

Тернопільський національний економічний університет

На правах рукопису

**Піговський Юрій Романович**

УДК 519.24

**Математичні моделі нечітких процесів в системах Моно-  
Ієрусалимського та методи їх ідентифікації**

01.05.02 – Математичне моделювання та обчислювальні методи

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата  
технічних наук

Науковий керівник:

**Пасічник Роман Мирославович,**  
кандидат фізико-математичних наук,  
доцент

Тернопіль – 2008

## ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ.....	4
ВСТУП .....	5
РОЗДІЛ 1 МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ МОНО-ІЕРУСАЛИМСЬКОГО.....	12
1.1. Проблеми моделювання хіміко-технологічних систем.....	12
1.2. Методи ідентифікації моделей ХТС Моно-Іерусалимського .....	26
1.3. Управління хіміко-технологічним процесом з мінімальними побічними продуктами.....	40
1.4. Висновки першого розділу .....	49
РОЗДІЛ 2 МЕТОДИ ІДЕНТИФІКАЦІЇ ТОЧКОВИХ МОДЕЛЕЙ ЧАСТКОВО СПОСТЕРЕЖУВАНИХ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ .....	51
2.1. Методи ідентифікації автономних моделей ХТС з непостережуваною змінною стану концентрації мікроорганізмів .....	51
2.2. Методи ідентифікації керованих зворотнім зв'язком ХТС з непостережуваною змінною стану концентрації субстрату.....	60
2.3. Методи ідентифікації термокерованих ХТС в умовах повної та часткової спостережуваності.....	71
2.4. Висновки другого розділу.....	77
РОЗДІЛ 3 МЕТОДИ ІДЕНТИФІКАЦІЇ НЕЧІТКИХ МОДЕЛЕЙ ХІМІКО- ТЕХНОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ .....	78
3.1. Нечітка модель ХТС.....	78
3.2. Адаптивна нечітка модель ХТС на основі агрегату точкових термокерованих моделей .....	86
3.3. Управління хіміко-технологічним процесом з мінімальними побічними продуктами в умовах невизначеності .....	101
3.4. Висновки третього розділу .....	113

РОЗДІЛ 4 ЧИСЕЛЬНІ ЕКСПЕРИМЕНТИ З МОДЕЛЯМИ ХТС .....	115
4.1. Математичне моделювання процесів бродіння browарної та виноробної промисловостей.....	115
4.2. Чисельні експерименти параметричної ідентифікації моделей частково спостережуваних ХТС .....	120
4.3. Чисельні експерименти ідентифікації нечітких моделей ХТС в умовах невизначеності .....	130
4.4. Експериментальні результати синтезу управління хіміко- технологічним процесом browарного бродіння з мінімальними побічними продуктами.....	136
4.5. Висновки четвертого розділу .....	143
ВИСНОВКИ.....	145
ДОДАТОК А. Форми функцій належності, побудовані по спостереженій множині 30 виробничих траєкторій .....	147
ДОДАТОК Б. Алгоритм прогнозування динаміки траєкторій, що виходять за межі прогнозного коридору .....	148
ДОДАТОК В. Графічний інтерфейс користувача для модуля параметричної ідентифікації точкових моделей ХТС.....	150
ДОДАТОК Д. Вплив регуляризуючого параметра $\alpha$ в процедурі параметричної ідентифікації точкових моделей ХТС з непостережуваною змінною стану концентрації мікроорганізмів.....	151
ДОДАТОК Е. Результати модельних задач параметричної ідентифікації автономних ХТС.....	154
ДОДАТОК Ж. Лістинг модуля адаптивного прогнозування нечітких процесів в ХТС Моно-Іерусалимського.....	155
ДОДАТОК З. Акти про впровадження результатів дисертаційної роботи.....	168
СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ.....	174

**ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ**

ФХС	Фізико-хімічна система
Періодична система	Хіміко-технологічна система з періодичним режимом
Періодичний процес	Хіміко-технологічний процес, що відбувається в хіміко-технологічній системі з періодичним режимом
Протічна система	Хіміко-технологічна система з неперервним режимом
Протічний (неперервний) процес	Хіміко-технологічний процес, що відбувається в хіміко-технологічній системі з неперервним режимом
Термокерована модель	Математична модель термокерованої хіміко-технологічної системи
Термокерована система диференціальних рівнянь	Неавтономна система диференціальних рівнянь, що слугує моделлю термокерованої хіміко-технологічної системи
ХТП	Хіміко-технологічний процес
ХТС	Хіміко-технологічна система

## ВСТУП

**Актуальність теми.** На сучасному етапі розвитку суспільних продуктивних сил одне з чільних місць займають технологічні процеси відновлення енергетичних та природних ресурсів, харчової і фармацевтичної промисловостей. Вони відбуваються в хіміко-технологічних системах (ХТС) Моно-Ієрусалимського з періодичним або неперервним режимом. В ХТС вноситься субстрат, система мікроорганізмів, інколи додаткові ініціюючі речовини, а в результаті реакції утворюються основні (цільові) та побічні продукти. Основними параметрами процесів служать температура, тиск і лужність середовища, причому температура може виступати управляючим параметром.

Проведення процесів в неперервному режимі економічно ефективніше, ніж у періодичному, однак ряд важливих технологічних процесів може відбуватися тільки в останньому. Це, зокрема, виробництво алкогольних та кисломолочних харчових продуктів, а також таких фармацевтичних препаратів як вітаміни, антибіотики, гормони. Тому дослідження ХТС з періодичним режимом становить особливий інтерес. Завданням їх математичного моделювання є дослідження динаміки концентрацій згаданих речовин в реакційній ємності системи.

В монографіях [Жаботинский А. М., 1974] та [Кафаров В. В., 1976-1986] закладено теоретичні основи моделювання ХТС на базі функціональних операторів та їх якісного аналізу з використанням теорії нечітких множин. З достатнім ступенем точності можна вважати, що зміни концентрацій відбуваються лише в часі, тому для моделювання ХТС користуються жорсткими системами нелінійних диференціальних рівнянь з початковими умовами. Проте динаміка процесів в системах характеризується значною невизначеністю, що виникає внаслідок їх реалізації колективами активних систем із складною поведінкою – системами мікроорганізмів. Невизначеність посилюється неоднорідністю останніх в умовах промислового використання.

Ідентифікація моделей ускладнюється неповною спостережуваністю динаміки стану ХТС в промислових умовах.

Моделюванню систем з періодичним режимом присвячено ряд досліджень. В роботах [Andrés-Toro B., 1997-2004] та [Carrillo-Ureta G. E., 2001] досліджено вплив температури реакції на динаміку основних та побічних продуктів. В роботі [Medawar W., 2003] розглянуто модель впливу керованого зворотнього зв'язку на затримку ферментаційного процесу.

Згадані моделі побудовано та досліджено лише в лабораторних умовах, а тому вони потребують доопрацювання для моделювання промислових технологічних процесів, які характеризуються суттєвішою невизначеністю. В роботі [Trelea I. C., 2002] побудовано адаптивну модель, де допущено, що невизначеність процесу присутня лише в одному з параметрів рівняння стану побічного продукту. Значення цього параметру уточнюється в міру нагромадження експериментальних спостережень, проте вплив невизначеності на основні параметри і змінні стану ХТС там не досліджено. В роботі [Lin Y., 2006] методами інтервального аналізу досліджено вплив апріорно заданої невизначеності на параметри та початкові умови автономної системи. Однак цей підхід не дозволяє налаштовувати модель під конкретні процеси, а також не враховує вплив температури та зворотнього зв'язку з продуктом на їх перебіг.

У випадку аналізу широких інтервалів невизначеності ефективними є адаптивні моделі, котрі уточнюють прогноз стану ХТС в міру нагромадження даних експериментальних спостережень за її динамікою. Переважна більшість побудованих адаптивних моделей [Smets I. Y., 2003], [Ляшенко И. Н., 1996], [Чуб К. Ф., 2000], [Mailleret L., 2004] та [Lubenova V., 2000] призначені для моделювання динаміки систем з неперервним режимом, де вони використовуються для забезпечення оптимальної швидкості перебігу процесів шляхом регулювання по відхиленню. Однак оптимальна швидкість проходження процесів в системах з періодичним режимом невідома, тому використання згаданих моделей для їх прогнозування неможливе.

Таким чином, побудова адаптивних моделей динаміки систем з періодичним режимом, що враховують невизначеність параметрів процесу є актуальною задачею. Її розв'язання дозволить покращити управління згаданими технологічними процесами в умовах промислового використання.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами і темами.** За темою дисертації проводилася науково-дослідна робота у відповідності з координаційним планом науково-технічних програм Міністерства освіти та науки України, розділ “Методи оптимізації, програмне забезпечення та інформаційні технології у складних системах”, планів навчальної та науково-дослідної роботи Тернопільського національного економічного університету, зокрема: науково-дослідної роботи на тему “Методи та засоби математичного моделювання складних систем на основі теоретико-множинного та інтервального підходів” (0106U012529) та українсько-бельгійського науково-дослідного проекту по гранту NATO Linkage Collaborative Grants Program: “Development of Precision Control System for Thermal Objects Control” (PST.CLG.977647). Участь здобувача полягає у дослідженні підходів до моделювання хіміко-технологічних систем, розробленні методів, алгоритмів та програмного комплексу їх ідентифікації.

**Мета і задачі дослідження.** Метою дослідження є розробка адаптивних моделей нечітких процесів в системах Моно-Ієрусалимського, методів їх ідентифікації та управління ними з мінімальними кінцевими інтенсивностями побічних продуктів. Для досягнення цієї мети у дисертаційній роботі поставлено завдання:

- проаналізувати відомі адаптивні моделі динаміки систем з неперервним та періодичним режимом, визначити можливі напрямки їхнього розвитку;
- розробити підхід до ідентифікації точкових моделей в умовах неповноти експериментальних даних, а саме відсутності спостережень траєкторії концентрації мікроорганізмів;
- розробити адаптивну модель нечітких процесів на базі агрегату ідентифікованих термокерованих точкових моделей;

– з використанням вищезгаданої моделі розробити метод температурного управління технологічним процесом, що мінімізує кінцеві інтенсивності побічних продуктів.

*Об'єкт досліджень:* нечіткі процеси в системах Моно-Ієрусалимського.

*Предмет досліджень:* адаптивні моделі динаміки нечітких процесів в системах Моно-Ієрусалимського та методи їх ідентифікації.

*Методи досліджень:* комп'ютерне моделювання з використанням експериментальної бази вимірювань в умовах конкретних виробничих процесів. Вирішення поставлених в дисертації задач здійснювалося за допомогою методів лінійної алгебри, оптимізації і чисельного розв'язання жорстких систем звичайних диференціальних рівнянь для параметричної ідентифікації точкових моделей систем Моно-Ієрусалимського, теорія нечітких множин для врахування невизначеності їхнього стану.

### **Наукова новизна отриманих результатів.**

1. Отримав подальший розвиток метод параметричної ідентифікації точкових моделей систем Моно-Ієрусалимського з неспостережуваною змінною стану для автономного, керованого зворотнім зв'язком та термкерованого випадків на основі модифікації функції мети, врахування природніх обмежень на ідентифіковані коефіцієнти, а також спеціальних схем ідентифікації. Метод забезпечує збіжність процедури ідентифікації для вказаних типів задач при застосуванні відповідного початкового наближення.

2. Вперше розроблено метод побудови початкового наближення в задачі параметричної ідентифікації автономних моделей системи Моно-Ієрусалимського на основі формалізації її типових характеристик, що забезпечило збіжність процедури параметричної ідентифікації при використанні градієнтних методів.

3. Отримав подальший розвиток метод агрегату точкових моделей для побудови адаптивних моделей нечітких процесів в системах Моно-Ієрусалимського. Метод доповнено процедурами уточнення прогнозного коридору у випадку розташування спостережуваних значень поблизу



найвірогідніших, що забезпечило його звуження для всіх можливих випадків динаміки спостережуваних значень.

4. Вперше розроблено метод управління процесом в періодичній системі Моно-Ієрусалимського з мінімальними інтенсивностями побічних продуктів на основі агрегату точкових моделей та генетичного алгоритму. Цей метод на відміну від існуючих, враховує невизначеності оцінок як основного, так і побічних продуктів, дає змогу виявляти напрямки покращення технологічних процесів вказаного виду, забезпечуючи підвищення їхньої узагальненої характеристики в середньому на 11 % за оцінкою мінімального ризику.

**Практичне значення отриманих результатів** полягає в тому, що на основі розроблених математичних моделей та методів їх ідентифікації реалізовано програмний комплекс, який моделює динаміку процесів з періодичним режимом в умовах конкретного виробництва і надає рекомендації щодо управління ними з метою забезпечення бажаних кінцевих інтенсивностей основного і побічних продуктів. Це програмне забезпечення використано в ВАТ “Бровар” (Тернопіль – Микулинці) для моделювання технологічних процесів та спостереження за їхнім ходом, покращення якості продукції і підготовки кваліфікованого персоналу. Крім того, на його базі розроблено методичне забезпечення, яке використовують у навчальному процесі в Тернопільському національному економічному університеті для викладання дисциплін “Теорія і методи оптимізації” та “Моделювання систем”.

Основні результати дисертаційної роботи використано:

– для врахування невизначеності і неповноти експериментальних даних при параметричній ідентифікації та моделюванні систем Моно-Ієрусалимського за допомогою адаптивних моделей нечітких процесів при виконанні науково-дослідної роботи на тему “Методи та засоби математичного моделювання складних систем на основі теоретико-множинного та інтервального підходів” (номер державної реєстрації 0106U012529);

– для управління процесом завантаження періодичного термоагрегату із заданим технологічним режимом термообробки за допомогою методів

стохастичної оптимізації при виконанні українсько-бельгійського науково-дослідного проекту по гранту NATO Linkage Collaborative Grants Program “Development of Precision Control System for Thermal Objects Control” (PST.CLG.977647).

**Особистий внесок здобувача.** Усі наукові результати, викладені у дисертаційній роботі, отримані автором особисто. У друкованих працях, опублікованих у співавторстві, здобувачу належать: формулювання задач моделювання термодерованих систем Моно-Ієрусалимського в умовах невизначеності на неповноті експериментальних даних [32], методи параметричної ідентифікації сімейства автономних і термодерованих точкових моделей частково спостережуваних систем [109], адаптивна нечітка модель динаміки стану систем на основі агрегату ідентифікованих точкових моделей [33], метод температурного управління процесом, що мінімізує інтенсивність побічних продуктів хіміко-технологічної системи на основі генетичного алгоритму [34], методи структурної і параметричної ідентифікації систем з керованим зворотнім зв'язком [35], програмна реалізація та аналіз чисельних результатів моделювання перехідного процесу завантаження хіміко-технологічної системи [30, 31, 108].

**Апробація результатів дисертації.** Основні положення дисертації представлені і обговорювалися на 9 міжнародних конференціях, семінарах і симпозіумах: III Міжнародній науково-практичній конференції “Мікропроцесорні пристрої та системи в автоматизації виробничих процесів” (Хмельницький, 2004 р.); III Міжнародному науково-технічному симпозіумі “Інтелектуальні засоби збору даних і сучасні обчислювальні системи: розробка та застосування – IDAACS’2005” (Болгарія, Софія, 2005 р.); VIII та IX Міжнародних науково-технічних конференціях “Сучасні проблеми радіоелектроніки, телекомунікацій та комп’ютерної інженерії –TCSET’2006, TCSET’2008” (Львів – Славсько, 2006 та 2008 рр.); XIII Міжнародній конференції з автоматичного управління “Автоматика 2006” (Вінниця, 2006 р.); IX Міжнародній науково-технічній конференції “Досвід розробки й

застосування САПР в мікроелектроніці – CADSM'2007” (Львів – Поляна, 2007 р.); V Міжнародній науково-практичній конференції “Комп’ютерні системи в автоматизації виробничих процесів – КСАВІ 2007” (Хмельницький, 2007 р.); Міжнародній науково-технічній конференції Національного авіаційного університету “Комп’ютерні системи та мережні технології 2008” (Київ, 2008 р.), Літній школі-семінарі “Індуктивне моделювання: теорія і застосування” Міжнародного науково-навчального центру інформаційних технологій і систем НАН та МОН України (Київ – Жукин, 2008 р.)

**Публікації.** Основні результати дисертаційної роботи висвітлено в 10 друкованих працях, загальним обсягом 53 сторінки, у тому числі 6 публікацій – у фахових наукових виданнях та 4 – у матеріалах конференцій. Дві статті – одноосібні.

# РОЗДІЛ 1

## МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ МОНО-ІЄРУСАЛИМСЬКОГО

### 1.1. Проблеми моделювання хіміко-технологічних систем

Хіміко-технологічні процеси (ХТП) складають основу виробництв багатьох галузей промисловості: хімічної, нафтопереробної, коксогазової, металургійної, целюлозно-паперової, харчової, енергетичної, виробництва будівельних матеріалів, полімерних виробів та теплоізоляційних сумішей. В ХТП реалізуються різноманітні фізичні, хімічні, мікробіологічні, механічні і гідромеханічні явища, за допомогою яких здійснюється цілеспрямований вплив на оброблюване технологічне середовище з метою отримання певного кінцевого результату. Таким результатом може виступати, наприклад, відокремлення компонентів, виділення цільового компонента, зміна агрегатного стану, подрібнення частин, змішування фаз [46].

ХТП відбуваються в хіміко-технологічних системах (ХТС), що можуть складатися як з однієї так і з множини взаємопов'язаних фізико-хімічних систем (ФХС). Фізико-хімічна система (ФХС) або реактор – це багатофазове багатокомпонентне суцільне середовище, розподілене в просторі і змінне в часі, в кожній точці гомогенності якого і на границях поділу фаз відбувається перенесення речовини, енергії та імпульсу при наявності джерел або витоків останніх [20, 21].

На вхід ХТС надходять потоки суцільного середовища, які характеризуються вектором  $\vec{u}$  вхідних змінних, до яких можна віднести склад і температуру фаз, що поступають на фізико-хімічну переробку, тиск, швидкість, густину, концентрацію, в'язкість, характеристики дисперсності і т.п. В межах ХТС вхідні змінні  $\vec{u}$  (реагенти) зазнають цілеспрямованих фізико-хімічних перетворень в змінні  $\vec{v}$  (продукти) підчас відповідного хіміко-технологічного процесу (ХТП), або, іншими словами, вектор  $\vec{u}$  під дією технологічного оператора  $\Psi$

хіміко-технологічної системи перетворюється у вектор вихідних змінних  $\vec{y}$  [21]

$$\vec{y} = \Psi(\vec{u}). \quad (1.1)$$

Поняття технологічного оператора ХТС формалізує відображення простору змінних входу в простір виходу, що відповідає реальному ХТП. Виходячи з особливостей реальних процесів, можна стверджувати, що оператор  $\Psi$  має складну структуру. Це обумовлено тим, що він, як правило, є суперпозицією (або результатом накладання) цілого ряду „елементарних” технологічних операторів: хімічного і фазового перетворення; дифузійного, конвективного і турбулентного перенесення речовини і теплоти; змішування і т.д. В загальному випадку оператор  $\Psi$  відображає сукупність лінійних, нелінійних, розподілених в просторі і змінних в часі процесів і має змішану детерміновано-стохастичну природу [21].

Входи ХТС  $\vec{u}$  можна умовно поділити на основне середовище і додатково введені компоненти. Під час процесу відбуваються фізико-хімічні, механічні або гідромеханічні перетворення і в результаті отримують кінцеві продукти  $\vec{y}$ , які можна поділити на цільовий продукт, побічні продукти, відходи і вторинні матеріальні ресурси. ХТС бувають двох видів: з неперервним і періодичним режимом. На вхід системи з неперервним режимом основне середовище разом з іншими компонентами поступає неперервним потоком, а продукти неперервним потоком виводяться з неї. На вхід системи з періодичним режимом компоненти подаються одноразово на початку ХТП, а продукти, також одноразово, виводяться після його завершення [15]. Надалі, для скорочення, системи з неперервним режимом називатимемо протічними системами, а системи з періодичним режимом – періодичними системами. ХТП, що відбуваються в цих системах називатимемо, відповідно, періодичними і неперервними (протічними) ХТП.

Реальному відображенню (1.1) співставляється його математична модель

$$\hat{\vec{y}} = \Phi(\vec{u}, \vec{x}) \quad (1.2)$$

у формі функціонального оператора  $\Phi$ , який перетворює функціональний простір вхідних змінних  $\vec{y}$  і простір змінних стану самої ХТС  $\vec{x}$  в простір оцінок вихідних змінних  $\hat{\vec{y}}$ . Модель (1.2) – це ідеалізація відображення (1.1), що описує найсуттєвіші сторони явища.

В явній формі оператор, що здійснює відображення (1.2), представляє замкнуту систему диференціальних, інтегральних, інтегро-диференціальних рівнянь і співвідношень емпіричного характеру, доповнену необхідними початковими і (або) крайовими умовами. Побудова адекватної математичної моделі вимагає розв'язання задачі ідентифікації цієї системи як у широкому, так і у вузькому сенсі. Ідентифікація у широкому сенсі полягає у синтезі функціонального оператора  $\Phi$ , тобто побудові згаданої системи рівнянь (структурна ідентифікація). Ідентифікація ж у вузькому сенсі полягає в оцінюванні значень її параметрів (параметрична ідентифікація). При ідентифікації вектор істинних вихідних змінних  $\vec{y}$  не співпадає з виходом моделі  $\hat{\vec{y}}$  внаслідок того, що оператор  $\Phi$  – це наближена характеристика технологічного оператора  $\Psi$ . Необхідною умовою успішної ідентифікації виступає тотожність відображень  $\Psi$  і  $\Phi$ , тобто близькість функцій  $\vec{y}$  та  $\hat{\vec{y}}$  в сенсі деякої метричної норми [21].

При синтезі структури функціонального оператора  $\Phi$  однією з основних проблем є вибір щонайменшої кількості змінних і параметрів, які, однак, достатні для вірного відображення найсуттєвіших властивостей ХТС. Ці властивості розрізняються в залежності від мети, що була поставлена при побудові конкретного функціонального оператора (моделі). Тобто з метою досягнення різних цілей для однієї і тієї ж самої ХТС можна побудувати різні моделі.

Задача побудови функціонального оператора, який би адекватно і з достатньою точністю відображав поведінку реальної ХТС ускладнюється значним впливом невизначеності на її динаміку. Невизначеність з'являється внаслідок значних степеней нелінійності, суттєвої розподіленості параметрів в

просторі і часі, нестаціонарності і взаємної корельованості вхідних шумів та похибок вимірювання, неперервного дрейфу технологічних показників процесів та деформації їхньої фізико-хімічної структури [21]. В багатьох випадках перелічені ефекти – прояв процесу так званої самоорганізації в складних ХТС. Процесом самоорганізації називаються явища, при яких в системах, внаслідок нестійкості втрачається початкова просторово-часова організація і замість неї встановлюється нова. Наприклад, стаціонарний просторово-однорідний розподіл концентрацій речовин в ХТС, за певних умов може стати нестійким і на зміну йому придуть автоколивання, тобто стійкі самопідтримувані періодичні коливання або хвилі хімічної активності [42].

Згідно з Прігожиним І. [37], процеси самоорганізації проходять в сильно нерівноважних умовах, джерелом яких є різного роду флуктуації. При перевищенні флуктуаціями деякого критичного значення, вони захоплюють всю систему, і вона починає еволюціонувати до нового стану. Критичне значення при цьому відповідає порогу стійкості системи і називається точкою біфуркації. В околі точки біфуркації відбуваються сильні флуктуації, тому ця область називається хаотичною. В ній важко передбачити напрям подальшого розвитку системи: чи перейде вона до тієї чи іншої форми самоорганізації чи стане хаотичною. При цьому навіть незначні дії можуть суттєво вплинути на вибір напрямку розвитку. Коли вибір напрямку відбувся, степінь нелінійності динаміки процесу починає зменшуватися [12]. В загальному випадку точок біфуркації може бути кілька і кожна з них призводить до певного типу організації системи [42].

Питаннями про те, які механізми обумовлюють виникнення нестійкості і як відбувається перехід до нового впорядкованого стану, займається спеціальна міждисциплінарна галузь науки – синергетика. Синергетичні дослідження ряду фізичних (синтез лазерних променів, турбулентний потік води), хімічних (реакція Білоусова-Жаботинського) та біологічних (коливання чисельності популяцій, просторово-часова організація мікроорганізмів) проведено в монографіях Хакена Г. [48], Курдюмова С.П. [25] та Князевої [23].

Всі розглянуті математичні моделі ХТС (1.2) класифікуватимемо за наступними критеріями: ступенем функціонального оператора, способом побудови його структури, просторовою розподіленістю змінних стану і параметрів, врахуванням їх невизначеності та адаптивністю.

За ступенем функціонального оператора, моделі можна поділити на лінійні та нелінійні [9]. За способом побудови структури функціонального оператора, моделі можна поділити на дедуктивні, індуктивні та комбіновані дедуктивно-індуктивні. В дедуктивних моделях структура функціонального оператора встановлюється дослідником апріорі на основі тих чи інших фізичних міркувань (законів) стосовно елементів ХТС і їх взаємозв'язку. Побудова структури оператора індуктивної моделі здійснюється на основі таблиці експериментальних даних шляхом перебору (послідовного випробовування) великої кількості альтернативних структур за допомогою комп'ютерного алгоритму індуктивного моделювання. Суть комбінованого індуктивно-дедуктивного підходу полягає в тому, що дослідник задає на вхід алгоритму індуктивного моделювання всі достовірні дані про систему, наприклад, структуру опорних або передавальних функцій, тип системи рівнянь, що дозволяє зменшити обсяг альтернативних структур функціонального оператора, які підлягають перебору. Індуктивне моделювання базується на принципі так званого зовнішнього доповнення [18].

Принцип зовнішнього доповнення покликаний усунути труднощі обґрунтування вибору єдиної структури функціонального оператора моделі, що описані теорією множинності моделей, яку висунули Шеннон, Мак-Каллок, Піттс та Ешбі. Згідно з нею, при моделюванні системи по скінченній кількості експериментальних даних принципово неможливо знайти єдину модель. Тобто для моделі з достатньо складною структурою завжди можна знайти такі оцінки її параметрів, при яких відхилення між скінченною вибіркою експериментальних даних та виходом моделі  $\hat{y}$  будуть як-завгодно малими або дорівнюватимуть нулю. Наприклад, якщо для моделювання системи задаються поліноміальним рівнянням регресії та існує  $N$  експериментальних точок, то



поклавши степінь полінома рівною  $N - 1$  отримаємо рівняння кривої, яка точно проходить усі експериментальні точки. Однак, очевидно, що це зовсім не свідчить про адекватність побудованої таким чином моделі [18].

Згідно з Івахненком О.Г. [18] в будь-якій роботі, де запропоновано єдину модель деякої системи, автори (свідомо чи підсвідомо) користуються тим чи іншим зовнішнім доповненням. Роль такого доповнення при побудові дедуктивних моделей виконує апіорі задана структура функціонального оператора.

Принцип зовнішнього доповнення базується на теоремі неповноти Геделя. Згідно з нею, критерії вибору моделей слід розділити на внутрішні та зовнішні. Критерій називається внутрішнім, якщо його визначення засноване на тих же даних, що використовувалися для отримання самої моделі. Зовнішнім називається критерій, визначення якого засноване на новій інформації, „свіжих” точках, що не використовувалися при синтезі моделі. Моделі, побудовані на основі лише внутрішніх критеріїв не можна вважати адекватними до модельованого явища. В індуктивних моделях зовнішнім доповненням виступає той чи інший зовнішній критерій, наприклад, похибка прогнозування на даних, що не використовувалися при їх побудові.

Побудова індуктивної моделі здійснюється шляхом поступового ускладнення структури її функціонального оператора, в ході якого зовнішній критерій перетинає мінімум, що дає можливість знайти єдину для даного критерію оптимальну модель. Глибина мінімуму служить мірою достовірності побудованої моделі.

За просторовою розподіленістю змінних стану і параметрів функціональні оператори моделі можна поділити на два види: з розподіленими та зосередженими параметрами. Оператори з розподіленими параметрами враховують гетерогенність змінних стану ХТС як в часовій так і в просторовій областях. Їхня динаміка описується системи диференціальних рівнянь в частинних похідних з початковими і крайовими умовами. Побудова операторів з зосередженими параметрами ґрунтується на так званому допущенні повного

перемішування, що включає однорідність заповнення об'єму системи та того, що її змінні стану мають однакові значення в усіх точках простору. Такі оператори описуються системами звичайних диференціальних рівнянь з початковими умовами [21, 42].

За критерієм врахування невизначеності змінних стану і параметрів моделі можна поділити на точкові, інтервальні, нечіткі та стохастичні. Принципова відмінність точкових моделей (детермінованих) від моделей з врахуванням невизначеності (інтервальних, нечітких та стохастичних) полягає в тому, що побудова точкових моделей заснована на допущенні про те, що існує деяка ідеальна структура (апріорі невідома в індуктивних моделях), яка адекватно і з достатньою точністю описує реальний процес. В той же час моделі з врахуванням невизначеності такого допущення не вимагають і вважається що жодна структура неспроможна відобразити динаміку процесу бездоганно [9, 29, 128].

При прогнозуванні динаміки процесу з використанням точкових моделей відхилення модельних оцінок від спостережень реального процесу вважаються шумом, рівень якого не досліджується, тоді як відхилення прогнозів в моделях з врахуванням невизначеності – предмет дослідження самих моделей, їхнє основне завдання.

За адаптивністю моделі можна поділити на неадаптивні, адаптивні по параметрах та адаптивні по структурі і параметрах. Неадаптивні моделі (звичайні) ігнорують спостереження динаміки поточної реалізації процесу, не використовуючи їх для уточнення свого функціонального оператора. В адаптивних моделях організовано замкнутий контур налаштування параметрів (і структури) функціонального оператора під поточну реалізацію процесу. Найчастіше адаптивні моделі належать до класу моделей з врахуванням невизначеності (інтервальних, нечітких або стохастичних), що використовують спостереження динаміки процесу для звуження інтервалів невизначеності.

В наведеній класифікації критерії впорядковано в порядку зростання складності моделей. Найпростішими будуть дедуктивні лінійні точкові моделі з зосередженими параметрами, до яких, наприклад, належать моделі лінійної

регресії. Теоретично, чим складнішою є модель, тим точніше вона може відобразити поведінку реального процесу.

В монографіях Прігожина І. за 1986 р. [37] та Рубіна А.Б. за 1999 р. [42] описано методи дослідження дедуктивних точкових розподілених моделей просторово-часової самоорганізації в ХТС. Ці методи дозволяють виявляти стаціонарні режими, що встановлюються в системі з плином часу та біфуркаційні значення і співвідношення між параметрами моделі (точки біфуркації), які призводять до того чи іншого типу її поведінки (розповсюдження збурень у вигляді бігучого імпульсу, стоячих хвиль, квазі-стохастичних хвиль, дисипативних структур та ін.). Розподілені моделі теоретично дозволяють відобразити еволюцію процесів в просторово-часовій області до найменших деталей, вимагаючи, однак для цього, детермінованого знання всіх його параметрів та початкових і крайових умов. Проте в цих монографіях не запропоновано методів їх ідентифікації. Тому вони мають радше теоретичну цінність.

В той же час ідентифікацію і дослідження моделей на основі операторів із зосередженими параметрами виконувати значно легше у порівнянні з розподіленими моделями. Це спрощує побудову моделей з врахуванням невизначеності на їх основі. Тому в практичних випадках намагаються уникнути складних розподілених моделей і використовувати простіші зосереджені, прийнявши допущення повного перемішування. Його можливо прийняти в трьох випадках: за умови неперервного механічного перемішування середовища ХТС (наприклад, в протічних системах) та за умов, коли роль моделі полягає не у виявленні просторової неоднорідності концентрацій в ході процесу, а у пошуку стійких режимів протічних систем (при  $t \rightarrow \infty$ ) або у знаходженні цих концентрацій в кінці періодичного процесу (при  $t \rightarrow t_{\max}$ ). Варто зазначити, що в останньому випадку характер просторової неоднорідності концентрацій в кінці процесу, як правило, відомий заздалегідь (одні речовини осідають на дно реактора, інші дефундують і однорідно заповнюють його простір), ще інші виділяються у вигляді газів і, володіючи

найменшою густиною, займають вершину реактора. Деякі аспекти розв'язання задач ідентифікації зосереджених моделей ХТС, зокрема з врахуванням невизначеності, розглянуто в літературі.

В цьому параграфі зосереджено увагу на висвітленні так званих універсальних підходів до моделювання, які розроблені таким чином, щоб їх можна було використовувати не зважаючи на специфіку тієї чи іншої ХТС. В наступному параграфі зосередимо увагу на моделях, котрі були розроблені спеціально для опису явищ, що відбуваються в ХТС класу Моно-Ієрусалимського.

В монографії Кафарова В. В. та Дорохова І. Н. за 1976 р. [21] описано підходи до ідентифікації лінійних та нелінійних функціональних операторів  $\Phi$  на основі теорії абстрактних динамічних систем, адаптації і навчання, розпізнавання образів реалізації процесу, теорії оптимальних фільтрів та статистичного методу ідентифікації систем з скінченною "пам'яттю".

Підхід на основі теорії абстрактних динамічних систем дозволяє проводити як структурну так і параметричну ідентифікацію нелінійних систем. Він ґрунтується на допущенні, що функціональний оператор ХТС можна описати рівнянням регресії поліноміальної форми. При цьому крім основного критерію мінімуму відстані між скінченими вибірками модельних  $\hat{y}$  та експериментальних  $\bar{y}$  оцінок вводяться додаткові, що мінімізують розмірність оператора. Для розв'язання задач ідентифікації з використанням цього підходу розроблено і успішно використовуються методи математичного програмування. Проте незважаючи на універсальність підходу, його використання для прогнозування нестационарних процесів утруднене, оскільки навіть повністю ідентифікована точкова модель не спроможна прогнозувати їхню динаміку внаслідок непередбачуваних змін фізико-хімічної структури і параметрів від реалізації до реалізації. З метою подолання цих труднощів використовують методи адаптації і навчання.

Ідея методів адаптації і навчання полягає в організації замкнутого контуру налаштування моделі під поточну реалізацію процесу. В монографії [21]

запропоновано метод адаптивного уточнення параметрів моделі шляхом регулювання по відхиленню за допомогою оптимізації методом диференціального числення. Його використання можливе лише за умов, коли структура функціонального оператора відома апріорі, а функція мети, що описує якість розв'язку задачі ідентифікації диференційована по всіх параметрах моделі. Останнє допущення, в загальному випадку, справедливе лише для лінійних моделей, що утруднює його використання при моделюванні ХТС.

За умов коли структура функціонального оператора невідома заздалегідь і допускається його нелінійність, в [21] запропоновано використовувати індуктивний підхід, в якому задача побудови функціонального оператора трактується як задача розпізнавання образів, яка може бути поставлена двояко. В першому випадку, образом, що підлягає розпізнаванню, виступає сам функціональний оператор  $\Phi$ . В другому випадку, замість функціонального оператора будується кібернетичний розпізнаючий пристрій, що прогнозує поведінку системи так само, як це зробив би відповідний функціональний оператор.

Ефективність розв'язання задачі розпізнавання визначається тим, наскільки ефективно організовано процес навчання розпізнаючого пристрою процедурі класифікації. Тому основна увага в проблемі розпізнавання образів зосереджена саме на процесі його навчання.

В основі формулювання задачі навчання лежить припущення, що існує ідеальне правило класифікації, згідно з яким об'єкти поділяються на класи. Його ще називають правилом "вчителя". Необхідно побудувати таке правило, за допомогою якого, після спостереження над діями вчителя можна було б класифікувати об'єкти приблизно в такий же спосіб, як це робить учитель. Очевидним недоліком даного підходу є той факт, що спостереження за вчителем можливо проводити лише у випадку наявності останнього. У випадку ж, якщо його немає – використання підходу неможливе.

З використанням теорії оптимальних фільтрів можна проводити оцінювання змінних стану та ідентифікацію ХТС. Однак стандартні методи побудови оптимальних фільтрів, зокрема фільтрів Калмана, ґрунтуються на допущенні про

лінійність функціонального оператора  $\Phi$ . Це викликає значні труднощі при їх використанні для розв'язання задач ідентифікації ХТС, оскільки для них характерна нелінійність, що є наслідком описаної вище невизначеності.

Для подолання проблем невизначеності в [21] розроблено теоретичні засади статистичного методу ідентифікації систем з скінченною “пам'яттю” із застосуванням аналітичних випадкових процесів та методу оцінювання вектора стану системи на основі інтегральних операторів. Ці методи полягають у виборі оптимальної структури інтегральних операторів технологічних процесів з позицій теорії масового обслуговування. Зазначається, що використання інтегральних операторів з скінченною пам'яттю теоретично дозволяє розв'язати задачу оцінювання і ідентифікації в просторі  $L_2$  на як-завгодно короткому інтервалі спостереження за системою. Однак запропонований там підхід вимагає перетворення нелінійних диференціальних операторів в лінійні або квазілінійні інтегральні оператори шляхом розкладу їхнього розв'язку по параметру або простої заміни змінних, що вдається зробити не для всіх нелінійних функціональних операторів.

Монографію Кафарова В. В., Дорохова І. Н. та Маркова Е. П. за 1986 р. [22] присвячено питанням якісного аналізу ХТС, який полягає в зборі, систематизації, формалізації і обробці якісної інформації. Метою якісного аналізу є виявлення і вивчення характерних ознак і властивостей найважливіших фізико-хімічних ефектів та їхньої динаміки в часі для побудови функціональних операторів ХТС. Розглянуто методи нечітких множин та нечіткої логіки для компактного представлення, формалізації і математичної обробки якісної інформації. Ці методи складають основу підходу до синтезу нечітких регуляторів, що дозволяють проводити моделювання і управління технологічними процесами з використанням досвіду і неформалізованих знань операторів-технологів.

Для оптимізації функціонування ХТС в [22] запропоновано підхід до формалізації і розв'язання задач прийняття рішень на основі методології нечітких множин. Також розроблено універсальний метод розв'язання задач

дослідження ХТС (оцінювання стану і параметрів), які зводяться до оптимізаційних задач з обмеженнями та складною нелінійною недиференційовною функцією мети. Даний метод базується на представленні екстремальної задачі у формі нечіткої функції мети і обмежень та їхнього суміщення через операцію перетину нечітких множин. Запропонований метод розцінюється як альтернатива методу звичайних штрафних функцій.

Моделювання і управління процесами на основі запропонованих в монографії нечітких регуляторів і методів прийняття рішень можливе лише для відслідковування і управління стаціонарними змінними стану, що не мають післядії, тобто їх майбутній стан цілком визначається поточним і не залежить від попередньої траєкторії, по якій система прийшла в цей стан. За інших обставин, при нестаціонарності змінних стану і присутності післядії, необхідно розробити метод адаптації, що поповнює і уточнює множину відношень і правил нечіткого регулятора або системи підтримки прийняття рішень в ході спостереження за поведінкою реальної системи. Проте такого методу там не розроблено.

В монографії Івахненка О.Г. за 1981 р. [18] розглянуто підходи до побудови точкових індуктивних моделей складних систем як з зосередженими так і з розподіленими параметрами на основі методів самоорганізації моделей та групового урахування аргументів (МГУА). Описані там підходи – універсальні і можуть бути використані для моделювання довільних динамічних систем, зокрема ХТС.

Івахненко О.Г. стверджує, що всі методи класичної теорії ідентифікації систем управління і регресійного аналізу розроблені з використанням лише внутрішніх критеріїв, таких як максимум правдоподібності і середньоквадратична похибка. Тому побудовані на їх основі моделі не можна вважати достовірними. Достовірними, на його думку, можна вважати моделі, функціональні оператори яких синтезовано з використанням зовнішніх критеріїв, на що в математичному моделюванні було звернено недостатню увагу.

З метою побудови адекватних моделей оптимальної складності

Івахненко О.Г. пропонує користуватися принципом зовнішнього доповнення. Його суть полягає в тому, що складність структури моделі вважається оптимальною тоді, коли значення певного зовнішнього критерію досягає мінімуму.

Метод самоорганізації моделей базується на принципі зовнішнього доповнення і полягає в розподілі таблиці експериментальних даних системи на дві частини, що називаються навчальною та перевіркою послідовностями, причому середньоквадратична похибка, що визначається на перевірочній послідовності (“критерій регулярності”), виступає критерієм для вибору структури моделі, що синтезується за даними навчальної послідовності. Синтез структури моделі з використанням методу самоорганізації моделей називається індуктивним моделюванням. Тоді як апріорне задання структури моделі – основа дедуктивного моделювання.

При самоорганізації моделей апріорна інформація, що необхідна для моделювання, зводиться до мінімуму: задаються “середовище моделювання” (таблиця даних) і зовнішній критерій. Всі інші достовірні апріорні дані про систему (наприклад, її структура), дозволяють зменшити об’єм перебору моделей. Перебору альтернатив підлягають лише ті питання, теорія яких апріорі достеменно невідома. В цьому і полягає комбінований дедуктивно-індуктивний підхід до моделювання.

Метод самоорганізації моделей реалізовано у різних алгоритмах. Зокрема, в монографії, що розглядається, розроблено два алгоритми так званого методу групового урахування аргументів (МГУА): комбінаторний алгоритм МГУА, що реалізує повний перебір всіх часткових моделей та багаторядний (пороговий) алгоритм МГУА, при якому частина моделей виключаються з перебору завдяки присутності порогів. У випадку з рівняннями регресії поліноміальної форми об’єктами перебору виступають степені та кількості доданків в заданих діапазонах.

Крім алгоритмів МГУА до методів індуктивного моделювання на основі ідеології самоорганізації моделей слід віднести методи моделювання штучних нейронних мереж, в яких задається та чи інша структура мережі з множиною



вихідних і вихідних сигналів. Після чого проводиться її навчання по навчальній вибірці сукупності реалізацій входів і виходів реальної системи шляхом коригування ваги зв'язків між її елементами (штучними нейронами). Навчену мережу верифікують шляхом оцінювання похибок її прогнозів на перевіірочній вибірці реалізацій входів і виходів системи [12].

В роботі Ахназорової С. Л. і Кафарова В. В. за 1985 р. [5] досліджено методи оптимального планування експериментів з метою підвищення якості і точності ідентифікації лінійних точкових моделей. В монографії Закгейма А.Ю. за 1982 р. [17] наведено теоретичну базу підходів до синтезу однокритеріального оптимального управління технологічними процесами, описано існуючі на той час методи її розв'язання за допомогою однокритеріальних багатовимірних оптимізаційних методів. В монографії чітко вказано обмеження однокритеріального методу, основним з яких є вимога єдиності критерію, тоді як в практичних випадках необхідно проводити оптимізацію процесу за цілим рядом взаємноперечних критеріїв. Особливо відзначено, що незважаючи на присутність деяких спроб розробки багатокритеріальних процедур оптимізації, на момент написання монографії не було методики, що була б придатна для широкого використання. Перша вдала робота в галузі багатокритеріальної оптимізації була опублікована Goldberg D.E. [82] тільки в 1989 р., тобто через сім років після написання згаданої монографії.

Підводячи підсумок наведеного опису існуючих універсальних підходів до моделювання ХТС, в рамках запропонованої класифікації, можна зробити наступні висновки. Лінійні моделі призначені для моделювання найпростіших явищ, що унеможлиблює їхнє використання при моделюванні складних нелінійних процесів, якими є хіміко-технологічні процеси в ХТС. Дедуктивні моделі ХТС не завжди адекватні до природи модельованого процесу, оскільки базуються лише на суб'єктивних міркуваннях дослідника та спостережених фізичних закономірностях, котрі не можна вважати достовірними для будь-якої реалізації процесу.

Просторово-розподілені моделі внаслідок складності (або неможливості)

отримання детермінованих значень початково-крайових умов і параметрів мають радше теоретичну цінність. Доцільність побудови зосереджених моделей обґрунтовується меншою кількістю невідомих параметрів і відсутністю крайових умов, що спрощує розв'язання задачі їх ідентифікації і побудови моделей з врахуванням невизначеності на їх основі.

Спільним недоліком точкових моделей слід вважати відсутність оцінок похибок моделювання, що пов'язані з принциповою неспроможністю отримання єдиної структури точкової моделі, яка б точно відтворювала будь-яку реалізацію нестационарного технологічного процесу. У випадку аналізу широких інтервалів невизначеності ефективними є адаптивні моделі, що уточнюють свої оцінки в міру нагромадження спостережень поточної реалізації процесу шляхом модифікації параметрів (і структури) функціонального оператора в замкнутому контурі.

Таким чином для моделювання хіміко-технологічних процесів в ХТС доцільно будувати нелінійні зосереджені індуктивні адаптивні моделі з врахуванням невизначеності. В наступному параграфі наведено опис моделей, що розроблялися спеціально для моделювання ХТС класу Моно-Ієрусалимського, дослідженню яких присвячена дана робота. Опис моделей наведено з використанням запропонованої в даному параграфі класифікації. При розробці нової моделі, яка покликана усунути недоліки існуючих взято до уваги висновки, отримані при аналізі як універсальних так і специфічних для ХТС Моно-Ієрусалимського підходів до моделювання.

## **1.2. Методи ідентифікації моделей ХТС Моно-Ієрусалимського**

Хіміко-технологічні системи Моно-Ієрусалимського використовуються в технологічних процесах відновлення енергетичних [88, 94] та природніх [11, 90, 103, 118] ресурсів, харчової [51, 58, 64, 67, 101, 123, 124] і фармацевтичної [74, 83, 107] промисловостей.

Проаналізуємо детальніше процес моделювання систем Моно-Ієрусалимського, що належать до класу ХТС хімічної кінетики. Вектор стану

ХТС хімічної кінетики  $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m)$  описує концентрації  $m$  різних речовин, що містяться в ній. В системі відбуваються хімічні перетворення цих речовин, що призводять до зміни їхніх концентрацій як в часовій так і в просторовій областях. ХТС хімічної кінетики бувають двох видів: чисто хімічні і ферментаційні. В чисто хімічних системах присутні тільки неорганічні речовини, каталізатором в них виступає також неорганічний реагент. Ферментаційні системи від чисто хімічних відрізняються тим, що в них деякі або всі речовини мають органічну або біологічну природу (білки, жири, вуглеводи), а каталізаторами в них виступають спеціальні речовини біологічної природи – ферменти [16, 42].

Більшість ХТС на основі ферментаційних систем складаються з єдиного ФХС – реактора. Зважаючи на невизначеність крайових умов і параметрів розподіленої моделі в промислових ХТС та на той факт, що при синтезі управління ХТП в періодичній системі достатньо точкових оцінок кінцевих концентрацій цільового і побічних продуктів, візьмемо за основу моделювання ХТС Моно-Ієрусалимського зосереджену модель. При цьому стан системи описується змінними часу  $\vec{x} = [x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t)]$ , а його еволюція, внаслідок взаємодії  $i$ -ї речовини з будь-якою із решти  $(m-1)$  речовин описується задачею Коші для системи  $m$  звичайних диференціальних рівнянь першого порядку [16, 42]

$$\begin{cases} x_1' = \varphi_1[x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t), A_1, A_2, \dots, A_{n_1}, u_1(t), u_2(t), \dots, u_{n_2}(t)], \\ x_2' = \varphi_2[x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t), A_1, A_2, \dots, A_{n_1}, u_1(t), u_2(t), \dots, u_{n_2}(t)], \\ \vdots \\ x_m' = \varphi_m[x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t), A_1, A_2, \dots, A_{n_1}, u_1(t), u_2(t), \dots, u_{n_2}(t)], \end{cases} \quad (1.3)$$

$$x_1(t_0) = x_1^0, \quad x_2(t_0) = x_2^0, \quad \dots \quad x_m(t_0) = x_m^0, \quad (1.4)$$

де  $\vec{x} = [x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t)]$  – вектор стану ХТС;  $x_i'$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$  – швидкості їхньої зміни (перші похідні функцій  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t)$ );  $x_i^0$  – їхні початкові значення в деякий момент часу  $t_0$ ;  $\varphi_i[\dots]$  – функції, що залежать від змінних

стану  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t)$ , вектора вхідних змінних  $\vec{u} = [u_1(t), u_2(t), \dots, u_{n_2}(t)]$  і сукупності внутрішніх параметрів системи  $A_1, A_2, \dots, A_{n_1}$ . До вхідних змінних належать: температура, тиск, лужність, вологість середовища, а до внутрішніх параметрів – константи рівнянь. Система у якій вхідні змінні  $u_1(t), u_2(t), \dots, u_{n_2}(t)$  не входять явно у праві частини рівнянь називається автономною.

Ідентифікація системи (1.3) у широкому сенсі полягає в пошуку невідомої структури функцій  $\varphi_i[\dots]$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$  (структурній ідентифікації). Ідентифікація ж у вузькому сенсі полягає в оцінюванні невідомих значень її параметрів  $A_1, A_2, \dots, A_{n_1}$  (параметричній ідентифікації). Для розв'язання задач ідентифікації користуються як ап'іорними даними про ХТС так і експериментальними даними про траєкторії її змінних стану [50].

Системи виду (1.3), що виконують роль функціональних операторів складних ХТС можуть містити велику кількість рівнянь, зазвичай нелінійних. За допомогою чисельних методів можна знайти їх часткові розв'язки при конкретних початкових умовах та значеннях параметрів. Знайти ж загальний розв'язок в аналітичному вигляді вдається лише для невеликого класу систем, в основному лінійних. Однак процеси в ХТС, як правило, суттєво нелінійні, що обумовлює нелінійність їхніх моделей. В моделях таких процесів праві частини рівнянь містять нелінійні члени, що викликає математичні труднощі при розв'язанні задач параметричної ідентифікації та оптимального управління процесами на їх основі [21, 42].

Процеси, що відбуваються в ферментаційних ХТС називаються ферментаційними процесами. На початку процесу в ферментаційну систему вноситься група реагентів та ферментів, а в його ході утворюється інша група речовин, що називаються продуктами. Хід процесу прискорюється каталізатором – ферментом. Сукупність речовин з якої складається основне середовище називається субстратом. Продукти утворюються шляхом перетворення речовин субстрату в ході ХТП. Існує клас багатостадійних процесів, в яких продукти можуть виступати субстратами на наступних стадіях

процесу [42]. Наприклад, в [83] на основі систем виду (1.3) побудовано модель ферментаційного синтезу антибіотику амоксициліну. Там враховано процес його гідролізу, де субстратом виступає сам амоксицилін.

Ферментаційні системи, як і будь-які інші ХТС, бувають з неперервним і періодичним режимами. В системі з неперервним режимом субстрат поступає неперервним потоком в систему, а продукти неперервним потоком виводяться з неї. В системі з періодичним режимом введення речовин відбувається на початку процесу, а виведення – вкінці.

Ферментаційні системи за динамікою змінних стану можна умовно поділити на три типи: системи з стійким стаціонарним станом, тригерні системи та коливні системи. Особливістю систем з стійким стаціонарним станом є те, що вони з будь-якого початкового стану (1.4) переходять в деякий єдиний стійкий стаціонарний стан за скінченний проміжок часу [42].

Тригерна система характеризується кількома стаціонарними станами (так званими особливими точками), між якими вона може перемикатися за скінченні проміжки часу під впливом зміни значень тих чи інших параметрів або стану системи. Якщо така система функціонує в одному з своїх стійких режимів, то її не можна вивести з нього під впливом незначних збурень. У випадку, якщо одна з особливих точок тригерної системи знаходиться на нестійкій гілці фазового портрету, то така система може здійснювати релаксаційні коливання, що стає підставою класифікувати її як коливну.

До коливних систем належать ті, що характеризуються нестационарністю та наявністю незатухаючих періодичних коливань (автоколивань) в значеннях змінних стану  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t)$  [42]. Для дослідження властивостей таких систем використовуються якісні методи аналізу динамічних систем, запропоновані Ляпуновим А. М. [26] та Андроном А. А. [3].

Дослідження термодинаміки незворотніх процесів показали, що коливання в системах можливі лише в точках, які знаходяться далеко від термодинамічної рівноваги. Для того, щоб існував нерівноважний стаціонарний стан, необхідно, щоб зміни концентрації двох різних груп речовин відбувалося в двох відмінних

масштабах часу. В ферментативних системах ця умова практично завжди виконується, оскільки, звичайно, концентрація субстрату значно перевищує концентрацію фермента, що в свою чергу, обумовлює можливість існування двох сильно відмінних масштабів часу для субстрату та фермент-вмістних комплексів. Часова ієрархія реагентів і умови наближеної стаціонарності для деяких з них (наприклад, для фермент-субстратного комплексу) можуть реалізуватися не тільки в системах з неперервним режимом, але й у системах з періодичним режимом. Проте в останніх ці умови виконуються лише протягом деякого обмеженого інтервалу часу, поки концентрація субстрату достатньо велика. Тому коливання в них завжди затухаючі, що обумовлює їх еволюцією до рівноважного стану [42].

Таким чином, коливання присутні практично в кожній ферментаційній системі, проте досліджувати їх не завжди доцільно. Якщо дослідника цікавить лише кінцева концентрація тієї чи іншої речовини після завершення процесу, а її коливання в ході процесу є достатньо високочастотні і мають незначну амплітуду у порівнянні з необхідною точністю, то коливаннями в системі можна знехтувати і трактувати її як просту систему з стійким стаціонарним станом. Такий підхід дозволяє суттєво спростити функціональний оператор математичної моделі системи [42].

Коливні системи досліджено в монографії Жаботинського А. М. за 1974 р. [16]. Коливні процеси присутні в технологіях хімічного синтезу хлориду амонію, люмінофорних композицій, при дослідженні коливань чисельності популяцій, що знаходяться на різних трофічних рівнях (моделі Лотки-Вольтера) та ін.

ХТС Моно-Ієрусалимського в літературі ще називаються системами культивування мікроорганізмів. В них, на відміну від класичних ферментаційних систем, концентрації ферментів не враховуються як окремі змінні стану системи, а враховується концентрація активних агентів – систем мікроорганізмів, які можуть містити цілий комплекс ферментів одночасно. Технологічні процеси в цих системах називаються процесами мікробіологічного синтезу.

На початку процесу в систему Моно-Ієрусалимського вноситься колектив мікроорганізмів, який проводить переробку субстрату на основний і побічні продукти. В систему з періодичним режимом одноразово вноситься деякий об'єм субстрату, а продукти вивантажуються після завершення процесу. У систему з неперервним режимом субстрат надходить неперервним потоком, а продукти неперервно виводяться разом із залишками непереробленого субстрату та частиною мікроорганізмів. Проведення процесів в неперервних системах економічно ефективніше ніж у періодичних, однак ряд складних технологічних процесів може відбуватися тільки в останніх. Це, зокрема, виробництво алкогольних та кисломолочних харчових продуктів, а також таких фармацевтичних препаратів як вітаміни, антибіотики, гормони. В дисертації досліджуються системи саме цього класу.

Вплив невизначеності на динаміку ХТС класу Моно-Ієрусалимського особливо сильний, оскільки ХТП, що відбувається в них, спричинені колективами активних систем – системами мікроорганізмів. Кожен елемент таких систем – одноклітинний мікроорганізм – окрема багатокомпонентна система із складною структурою. Тому колективи активних систем характеризуються складною самоорганізованою поведінкою.

На початку процесу, коли система мікроорганізмів потрапляє в середовище ХТС, відбувається так звана лаг-фаза, протягом якої мікроорганізми звикають до нових умов існування. Динаміка процесу на цьому етапі дуже нерівноважна, оскільки нові умови чинять на систему мікроорганізмів шокуючий вплив: інша температура, лужність, концентрація і склад субстрату, що є джерелом різного роду флуктуацій. Перед тим як мікроорганізм адаптується і вступить в активну взаємодію з середовищем, він використовує власні запаси, що дають йому початкову енергію [1]. Самоорганізований перехід в активний стан відбувається, згідно з Прігожиним І. [37] в одній з точок біфуркації, коли згадані флуктуації перевищують деяке критичне значення і захоплюють всю систему.

Описана самоорганізація сильніше проявляється в періодичних системах, слабше – у протічних. Це пов'язано з тим, що згадані флуктуації мають вплив

на весь процес періодичної системи, тоді як у протічній системі – лише на етапі її запуску. Мікроорганізми у системі з неперервним режимом за деякий час організуються в новому середовищі і в час її подальшого функціонування стабілізують свою динаміку, поступово нівелюючи вплив хаотичної області на етапі запуску. Крім того, в протічних системах, зазвичай, практикується процес неперервного перемішування, що сприяє гомогенності просторового розподілу концентрацій і, відповідно, зменшенню згаданих флуктуацій [42]. В той же час у системах з періодичним режимом хаотична область має визначальну роль на динаміку всього процесу, а гомогенність просторового розподілу концентрацій порушується в міру наближення до стійкого стаціонарного стану в кінці процесу, посилюючи просторові ефекти самоорганізації.

Вплив просторової неоднорідності концентрацій в промислових ХТС сильніший ніж в лабораторних аналогах, внаслідок більших геометричних масштабів. Ідентифікація їхніх моделей ускладнюється тим, що безпосереднє вимірювання змінних стану ХТС вимагає складних лабораторних досліджень і вони неповністю спостережувані в умовах промислового виробництва. Крім того, спостережувані вимірювання зашумлені похибками.

Розглянемо вплив невизначеності на перебіг ХТП в промислових ХТС Моно-Ієрусалимського з періодичним режимом. На рис. 1.1 представлено спостережену множину траєкторій змінної стану  $S(t)$  для ряду процесів, що відбувалися при однакових значеннях контрольованих параметрів.

Видно суттєве розходження значень концентрації субстрату  $S(t)$  в процесі до 49.09 % по відношенню до їхнього максимального значення  $S_0 = 110$ , див. рис. 1.1 (а). Також слід відзначити сильну відмінність в формі траєкторій, див. рис. 1.1 (б). Частина з них, що мають близьку динаміку на початку процесу, в другій його половині розходяться (траєкторії 4, 5, 9 та 10, 13), ті ж, що мали відмінну динаміку спочатку, до другої половини процесу сходяться (траєкторії 4, 10 та 9, 13). Тобто співпадіння траєкторій в окремих точках ще не свідчить про їхню еквівалентність протягом всього процесу. Подібні спостереження невизначеності наведено в роботах [91, 95, 123].



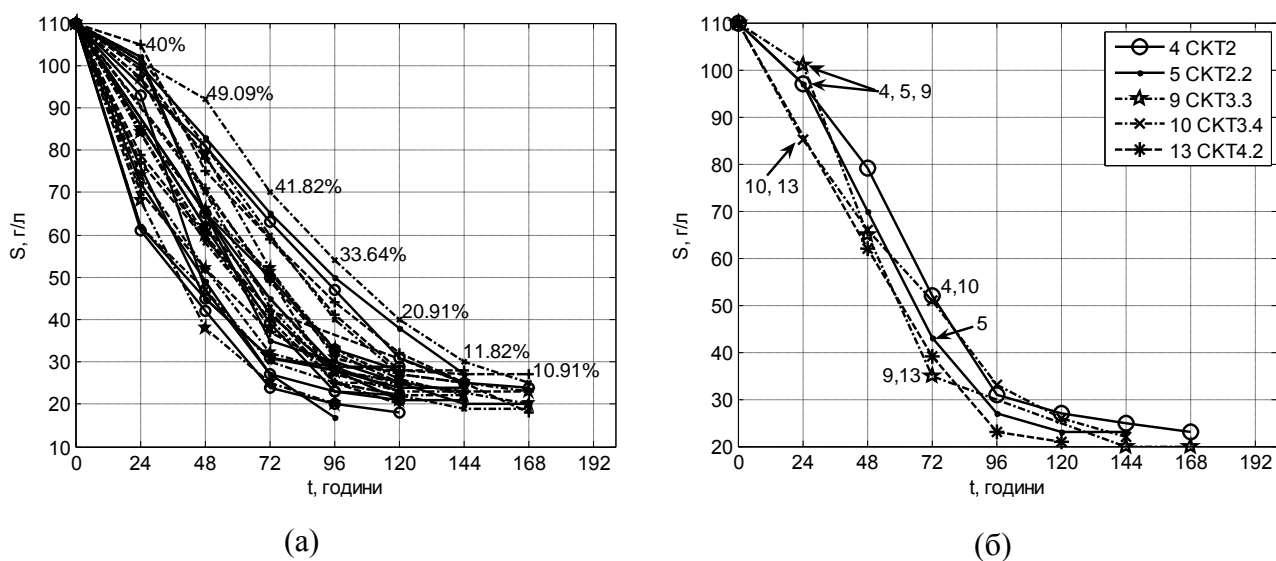


Рис. 1.1. Вплив невизначеності на реалізацію ХТП в ХТС з періодичним режимом при однакових значеннях контрольованих параметрів: (а) розходження значень траєкторій концентрації субстрату, (б) розбіжність їхньої форми

Наведені дані свідчать про актуальність розробки методів врахування невизначеності в ХТС Моно-Ієрусалимського з періодичним режимом. Розглянемо їхні зосереджені моделі на основі задач Коші (1.3), (1.4), які служать базою врахування невизначеності виробничих ХТП. Окремо вони можуть бути використані для моделювання динаміки ХТП в лабораторних умовах та дослідження часткових реалізацій промислових ХТП. Своїм розвитком вони зобов'язані роботам Ієрусалимського М. Д. [19], Robinson J. A. [113], Рубіна А. Б. [41, 42], Марі Дж. [28] та Дворецького Д. С. [13].

В найпростішому випадку можна допустити, що в ХТС присутня лише одна змінна стану ( $m=1$ ) – концентрація субстрату  $S(t)$ , яка має монотонно спадний характер. В цьому випадку динаміка процесу описується одним диференціальним рівнянням, запропонованим Леонором Міхаелісом та Мауд Леонорою Ментен в роботах від 1913 р. для моделювання процесів хімічного синтезу [66]

$$S'(t) = -A_1 \frac{S(t)}{A_2 + S(t)}, \quad (1.5)$$

з початковою умовою

$$S(0) = S_0, \quad (1.6)$$

де  $A_1$  – максимальна швидкість реакції,  $A_2$  – константа Міхаеліса,  $S(t)$  – змінна стану концентрації субстрату,  $S_0$  – початкова концентрація субстрату в періодичній системі. При високих рівнях концентрації субстрату  $S(t) \gg A_2$ , а отже  $S'(t) \approx -A_1$ , тобто швидкість споживання субстрату максимальна. При завершенні процесу, коли  $S(t) \rightarrow 0$ , то й швидкість його споживання  $S'(t) \rightarrow 0$ .

Для рівняння (1.5) розроблено багато методів оцінювання значень параметрів  $A_1$  і  $A_2$  по відомій траєкторії змінної стану  $S(t)$  як в інтегральній [66, 55, 65, 73] так і в диференціальній [56, 112, 121] формах. Проте воно може адекватно описувати динаміку процесу тільки у випадку слабкої залежності процесу споживання субстрату від динаміки росту системи мікроорганізмів, де нею можна знехтувати. Така ситуація спостерігається, наприклад, в період фази згасання процесу [113].

Цей недолік подолано в моделі, запропонованій Жаком Моно в 1942 р., де враховується додаткова змінна стану процесу ( $m=2$ ) – концентрація мікроорганізмів  $X(t)$ . В періодичній моделі Моно швидкості росту мікроорганізмів  $X'(t)$  та споживання субстрату  $S'(t)$  пропорційні до їхнього поточного рівня  $X(t)$  та концентрації поживного субстрату  $S(t)$ , звідки впливає система рівнянь [90]

$$\begin{cases} X'(t) = \left( A_1 \frac{S(t)}{A_4 + S(t)} - A_2 \right) X(t), \\ S'(t) = -A_3 \frac{S(t)}{A_4 + S(t)} X(t), \end{cases} \quad (1.7)$$

з початковою умовою

$$X(0) = X_0, \quad S(0) = S_0, \quad (1.8)$$

де  $X(t)$  – концентрація мікроорганізмів,  $S(t)$  – концентрація поживного субстрату,  $S_0$  – початкова концентрація субстрату,  $X_0$  – початкова концентрація мікроорганізмів в періодичній системі,  $A_1$  – коефіцієнт максимальної швидкості росту мікроорганізмів,  $A_2$  – коефіцієнт швидкості відмирання мікроорганізмів,  $A_3$  – максимальна швидкість реакції переробки субстрату,  $A_4$  – константа Моно, яка дорівнює концентрації субстрату при половині швидкості росту мікроорганізмів.

В системі Моно (1.7) фактором впливу на швидкість росту мікроорганізмів та зменшення концентрації субстрату виступає взаємодія субстрату та мікроорганізмів  $X(t) \cdot S(t)$ . При цьому невелике значення будь-якого з цих співмножників гальмує швидкість обох процесів. Також на ці швидкості впливає множник Міхаеліса-Ментен  $S(t)/[A_4 + S(t)]$ , роль якого проаналізовано вище. Окрім того, на концентрацію мікроорганізмів впливає процес їх відмирання, швидкість якого пропорційна їхній концентрації –  $A_2 X(t)$ . Модель Моно (1.7), (1.8) використана в [90] для оцінювання динаміки процесу очищення води і ґрунтів від канцерогенних та токсичних речовин (поліциклічних вуглеводів, нафталіну і 2-метилнафталіну).

В процесі використання моделі Моно встановлено, що вона не враховує зворотнього впливу продуктів розвитку мікроорганізмів на динаміку процесу періодичного культивування. Зокрема, при монотонному нагромадженні об'єму основного продукту  $P(t)$  відбувається гальмування процесів споживання субстрату та росту мікроорганізмів. Ця закономірність називається продуктним інгібуванням і враховується в сімействі моделей із зворотнім зв'язком (сімействі моделей Моно-Ієрусалимського) [36, 45, 61], що були запропоновані різними дослідниками в період з 1965 по 1998 рр. Моделі зворотнього зв'язку побудовані на основі класичної системи Моно (1.7), (1.8) шляхом введення передавальної функції росту  $H_g[S(t), P(t)]$  в рівняння змінної стану  $X(t)$  та

долученням рівняння інтенсивності основного продукту  $P(t)$

$$\begin{cases} X'(t) = (A_1 H_G[S(t), P(t)] - A_2) X(t), \\ S'(t) = -A_3 \frac{S(t)}{A_4 + S(t)} X(t), \\ P'(t) = -A_7 S'(t), \end{cases} \quad (1.9)$$

з початковою умовою

$$X(0) = X_0, \quad S(0) = S_0, \quad P(0) = 0, \quad (1.10)$$

де  $H_G[S(t), P(t)]$  – передавальна функція зворотнього зв'язку, яка описує залежність питомої швидкості росту мікроорганізмів від поточного рівня субстрату  $S(t)$  та інтенсивності основного продукту  $P(t)$ ,  $A_7$  – коефіцієнт продуктного синтезу<sup>1</sup>.

Оскільки параметр продуктного синтезу  $A_7$  для автономних систем постійний, то з врахуванням умови (1.10) інтегруючи третє диференціальне рівняння стану в системі (1.9) отримуємо еквівалентне алгебраїчне представлення

$$P(t) = A_7 [S_0 - S(t)]. \quad (1.11)$$

Згідно з дослідженнями Андре-Торо [52, 51] та Баллінга [10] для ХТП спиртового бродіння, що досліджуються в дисертації, коефіцієнт  $A_7$  можна вважати рівним 0.5.

Розглянемо представлення передавальної функції  $H_G[S(t), P(t)]$  зворотнього зв'язку в системі (1.9) для різних моделей продуктного інгібування. В моделі Хіншельвуда (Hinshelwood) [13, 57, 6, 101] допускається, що збільшення

---

<sup>1</sup> Індекс коефіцієнта продуктного синтезу навмисно вибрано починаючи з сьомого, щоб запобігти можливим конфліктам з моделями сімейства Моно-Ієрусалимського, що містять від 4 до 6 коефіцієнтів.

концентрації продукту  $P(t)$  призводить до спаду швидкості росту мікроорганізмів за лінійним законом, тобто

$$H_G[S(t), P(t)] = \frac{S(t)}{A_4 + S(t)} \left( 1 - \frac{P(t)}{A_5} \right), \quad (1.12)$$

де коефіцієнт  $A_5$  описує критичну концентрацію продукту, при якій повністю припиняється ріст мікроорганізмів [101]. В ході моделювання повинна виконуватися умова  $P(t) \leq A_5$ . Цю модель використано для моніторингу процесу спиртового бродіння в [57].

Модель інгібування Ієрусалимського використовує обернено-пропорційну залежність швидкості росту мікроорганізмів від концентрації продукту, запропоновану Ієрусалимським та Нероною [19, 27, 38, 49]

$$H_G[S(t), P(t)] = \frac{S(t)}{[A_4 + S(t)] \cdot [A_5 + P(t)]}, \quad (1.13)$$

де коефіцієнти  $A_4$  та  $A_5$  виконують схожу роль, забезпечуючи прямування похідної  $X'(t)$  до нуля при зменшенні концентрації субстрату  $S(t)$  або збільшенні інтенсивності основного виходу  $P(t)$  і запобігають діленню на нуль в межових точках процесу: на початку процесу, коли  $P(t) = 0$  та в кінці процесу, коли  $S(t) = 0$ .

Модель Бергтера [13] постулює сигмоїдний характер процесу продуктного інгібування

$$H_G[S(t), P(t)] = \frac{S(t)}{[A_4 + S(t)] \cdot [1 + P(t)^{A_6} / A_5]}, \quad (1.14)$$

де  $A_6$  – коефіцієнт, який повинен задовольняти умові  $A_6 \geq 1$ .

Відомі також випадки модифікації класичних моделей продуктного інгібування. Наприклад в роботі [98] для моделювання процесу спиртового

бродіння запропоновано модифікацію класичного закону Хіншельвуда (1.12)

$$H_G[S(t), P(t)] = \frac{S(t)}{A_4 + S(t)} \left( 1 - \left[ \frac{P(t)}{A_5} \right]^{A_6} \right). \quad (1.15)$$

Для моделювання броварного бродіння з продуктивним інгібуванням широко використовується спрощена версія моделі Моно-Ієрусалимського, розроблена В. de Andrés-Toro [51, 52, 53, 62, 75, 125], в якій на відміну від класичного представлення (1.13) відсутня складова  $[A_4 + S(t)]$  в знаменнику

$$H_G[S(t), P(t)] = \frac{S(t)}{A_5 + P(t)}. \quad (1.16)$$

Надалі модель інгібування (1.16) називатимемо моделлю Андре-Торо.

Така різноманітність в моделях зворотнього зв'язку вимагає порівняльного дослідження їхньої ефективності. Це дослідження слід проводити шляхом аналізу адекватності модельних оцінок після проведення параметричної ідентифікації сімейства моделей (1.12)–(1.16), що зроблено в §4.2.

Проаналізуємо роботи, присвячені моделюванню спеціально ХТС класу Моно-Ієрусалимського, акцентуючи увагу на запропонованих там методах врахування описаної невизначеності. В роботах Andrés-Toro [51–53] розроблено дедуктивну точкову модель для оцінювання траєкторій концентрації основного та побічних продуктів процесу під впливом динамічних температурних профілів. Параметрична ідентифікація даної моделі проводиться методами регресійного аналізу на основі експериментальних спостережень, які можна отримати лише для дрібномасштабних лабораторних ХТС з використанням лабораторної апаратури, зокрема, рідинного хроматографа високої роздільної здатності (HPLC). Зазначені лабораторні умови та відносна повнота вимірів дозволяють провести параметричну ідентифікацію моделі з високою точністю. Однак ідентифіковану таким чином модель не можна використовувати для прогнозування динаміки великомасштабних промислових ХТС через значний

вплив ефектів просторово-часової самоорганізації, відсутності оцінок похибок прогнозування та адаптивних властивостей моделі, що належить до загальних недоліків точкових дедуктивних моделей, описаних в попередньому параграфі.

Переважає більшість побудованих адаптивних моделей Ляшенко І. М. та Чуб Е. Ф. [27, 49], V. J. Impe [87], V. Lubenova, E. C. Ferreira [96], L. Mailleret, O. Bernard [99], I. Y. Smets, J. E. Claes [119] призначені для моделювання динаміки протічних процесів, де вони використовуються для забезпечення оптимальної швидкості їхнього перебігу за рахунок регулювання по відхиленню. Однак оптимальна швидкість проходження періодичних процесів невідома, тому використання згаданих моделей для їх прогнозування неможливе.

Роботу I. C. Trelea [123] присвячено розробці адаптивної стохастичної моделі періодичних ХТС для прогнозування траєкторій концентрації одного побічного продукту ( $P_{BN}$ ) під дією динамічних температурних профілів. При побудові цієї моделі Trelea виявив, що один з параметрів моделі ( $Y_0$ ) у більшій мірі варіюється від однієї реалізації процесу до іншої у порівнянні з рештою параметрів. На основі цього він постулює, що невизначеність присутня лише в цьому одному, особливо варіативному параметрі, тоді як решта параметрів моделі покладаються інваріантними до реалізації процесу. Джерелами невизначеності в даній моделі виступає згаданий варіативний параметр  $Y_0$  та похибка вимірювань концентрацій немонотонного продукту, що була присутня на етапі параметричної ідентифікації моделі. Оцінки моделі будуються у вигляді довірчих інтервалів прогнозованої траєкторії концентрації продукту  $P_{BN}$ , на основі допущень про нормальний розподіл обох джерел невизначеності. Межі довірчого інтервалу звужуються в ході процесу шляхом адаптивного уточнення параметра  $Y_0$  в міру надходження нових експериментальних спостережень концентрації згаданого побічного продукту. Недоліками цього підходу є те, що в він досліджує вплив невизначеності на оцінки лише побічного продукту і ніяк не враховується цей вплив на компоненти вектора

стану основної системи Моно-Ієрусалимського  $(X, S, P)$ , а також те, що джерела невизначеності динаміки немонотонного продукту досліджуються ізольовано.

В роботі М. Kobayashi [91] джерела невизначеності описано повніше, проте, подібно до згаданих раніше робіт Andrés-Toro, в запропонованій там математичній моделі їхній вплив на динаміку процесу зовсім не досліджується. Kobayashi вважає, що основними джерелами невизначеності виступають неоднорідність субстрату та номер генерації системи мікроорганізмів (кількість циклів процесу в яких вони використовувалися).

Розвиток зазначених досліджень здійснено в третьому розділі даної роботи, де розроблено нову математичну модель ХТС, котра володіє, подібно до моделі Trelea адаптивними властивостями і враховує невизначеність, спричинену неоднорідністю субстрату та складною поведінкою систем мікроорганізмів. Слід відзначити, що адаптивність запропонованої тут моделі не однопараметрична, як у Trelea, а багатопараметрична, тобто при надходженні нових спостережень динаміки процесу у звужені інтервалу прогнозування приймає участь не один, а всі параметри моделі. Ця особливість дозволяє прогнозувати динаміку усіх змінних стану системи і враховувати їхню невизначеність.

### **1.3. Управління хіміко-технологічним процесом з мінімальними побічними продуктами**

Синтез продуктів починається або одразу на початку розвитку системи мікроорганізмів або з незначною часовою затримкою [13]. Продукти характеризуються концентрацією корисних речовин (основного продукту) і допустимими рівнями шкідливих домішок (побічних продуктів). Основним управляючим параметром систем Моно-Ієрусалимського виступає температура [64].

Управління реакцією з врахуванням лише концентрації основного продукту вимагає забезпечення відомої з довідкових джерел оптимальної



температури росту для відповідної системи мікроорганізмів, що дозволить провести процес з оптимальним виходом основного продукту [24]. Але для практичних задач важливе значення мають математичні моделі, які можна використовувати для визначення умов проведення процесу з метою отримання бажаних рівнів як основного так і побічних продуктів [1, 4, 8]. Тому доповнимо розглянуту термокеровану модель (1.9), (1.12)–(1.16) підмоделями динаміки побічних продуктів.

Побічні продукти ферментації розрізняються за стійкістю. Одні продукти стійкі і не розпадаються після завершення процесу. Інші продукти настільки лабільні, що реакції їх синтезу і розпаду відбуваються одночасно. Далі стійкі продукти будемо називати монотонними побічними продуктами. А нестійкі продукти – немонотонними побічними продуктами.

Швидкість синтезу монотонних та немонотонних побічних продуктів пропорційна швидкості зброджування субстрату –  $S'(t)$ . При цьому коефіцієнт пропорційності в основному залежить від поточної концентрації субстрату і (або) температури середовища. Із врахування цих положень впливає наступне диференціальне рівняння динаміки концентрації монотонного побічного продукту

$$P'_{BM}(t) = -HS_{BM}[S(t), T(t), t]S'(t), \quad (1.17)$$

з початковою умовою  $P_{BM}(0) = 0$ , де  $P_{BM}(t)$  – концентрація монотонного побічного продукту (індекс  $BM$  означає Byproduct Monotonous),  $HS_{BM}[S(t), T(t), t]$  – функція, що описує залежність швидкості синтезу (символ  $S$  в позначені функції означає Synthesis) монотонного побічного продукту від концентрації субстрату  $S(t)$ , температури перебігу реакції  $T(t)$  та часу  $t$ ,  $S'(t)$  – перша похідна концентрації субстрату, тобто швидкість його споживання, яка має від'ємне значення, тому у правій частині (1.17) присутній знак мінуса.

Динаміка концентрації немонотонного продукту складніша. Як і у моделі монотонного побічного продукту (1.17) швидкість синтезу немонотонного

продукту пропорційна швидкості споживання субстрату  $-S'(t)$ . Однак, одночасно з синтезом, відбувається реакція розпаду, швидкість якої пропорційна до поточної концентрації немонотонного продукту  $P_{BN}(t)$ . Таким чином одержуємо наступне диференціальне рівняння для моделювання динаміки немонотонного побічного продукту

$$P'_{BN}(t) = -HS_{BN}[S(t), T(t), t]S'(t) - HD_{BN}[S(t), T(t), t]P_{BN}(t), \quad (1.18)$$

з початковою умовою  $P_{BN}(0) = 0$ , де  $P_{BN}(t)$  – концентрація немонотонного побічного продукту (індекс  $BN$  означає Byproduct Non-monotonous),  $HS_{BN}[S(t), T(t), t]$  – функція швидкості синтезу немонотонного побічного продукту (символ  $S$  в позначені функції означає Synthesis),  $HD_{BN}[S(t), T(t), t]$  – функція швидкості розпаду немонотонного побічного продукту (символ  $D$  в позначені функції означає Degradation, тобто розпад).

Для ряду періодичних технологічних процесів становить практичний інтерес задача мінімізації інтенсивностей немонотонних та монотонних побічних продуктів. Наприклад, в харчовій промисловості, ці побічні продукти негативно впливають на якість кінцевих виробів, оскільки псують їхні смакові та ароматичні характеристики або становлять канцерогенні домішки. Для розв'язання цієї задачі доцільно використовувати методи математичного моделювання. Адекватна математична модель виробничого процесу з заданими функціональними характеристиками дозволить отримати рекомендації щодо умов його проведення з метою забезпечення найменших інтенсивностей побічних продуктів. Розв'язок даної задачі полягає в пошуку такого температурного режиму процесу  $\vec{T}$ , який би мінімізував рівні побічних продуктів

$$\begin{cases} \min_{\vec{T}} f_1 = \min_{\vec{T}} P_{BN}(\vec{T}, t_{\max}), \\ \min_{\vec{T}} f_2 = \min_{\vec{T}} P_{BM}(\vec{T}, t_{\max}), \end{cases} \quad (1.19)$$

та забезпечував входження рівня основного продукту в інтервал

$$P^- \leq P(\vec{T}, t_{\max}) \leq P^+, \quad (1.20)$$

де  $P(\vec{T}, t_{\max})$ ,  $P_{BM}(\vec{T}, t_{\max})$  та  $P_{BN}(\vec{T}, t_{\max})$  – точкові оцінки кінцевих інтенсивностей основного та побічних продуктів при застосуванні температурного профілю, параметризованого у векторі  $\vec{T}$ .

Процес розробки методу розв’язання поставленої задачі складається з двох етапів: побудови методу параметризації температурного профілю процесу у векторі  $\vec{T}$  та вибору і настроювання оптимізаційного алгоритму для пошуку такої його реалізації, яка б забезпечувала розв’язок задачі (1.19), (1.20).

Побудова методу параметризації температурного профілю перш за все вимагає врахування природніх обмежень періодичного ферментаційного процесу. А саме, в процесі синтезу основного продукту  $P(t)$  відбувається дисиміляція поживного субстрату з виділенням енергії. Енергія дисиміляції спричиняє екзотермічну дію процесу, внаслідок чого температура реактора піднімається. При наступному увімкненні охолоджуючих пристроїв реактора екзотермічна дія процесу припиняється і його температура може лише знижуватися. Це обмеження процесу в літературі одержало назву правила однократного нагріву (англ. Increase Once Rule) [125].

Основним етапом у побудові методу параметризації температурного профілю є розробка процедури його кодування у стрічці дійсних чисел з яких складається вектор температурного режиму  $\vec{T}$ . В роботах [51, 53, 62, 125] описано два методи кодування температурного профілю. Перший метод запропоновано в роботах Андре-Торо, 1997 р. [53], Каррілло-Урети, 2001 р. [62] та Ксьао-Жі, 2004 [125], де час процесу розбивається на скінченні рівновеликі інтервали. Температурний профіль описується послідовністю дійсних значень, які задають температуру в градусах Цельсія на кінцях відповідних інтервалів. Отже для процесу, що налічує  $N$  таких інтервалів температурний профіль описується вектором дійсних чисел  $\vec{T}$ , що складається з  $N+1$  елементів.

Дослідження, наведені в роботах [53, 62, 125] свідчать, що температурні профілі, одержані з використанням комбінаторних оптимізаційних алгоритмів для першого методу кодування містять значні перепади температур між сусідніми інтервалами, що утруднює їхнє безпосереднє використання у промислових умовах. Тому для практичного використання одержаних результатів в даних роботах запропоновано додаткові алгоритми їх згладжування. Вони ґрунтуються на розбитті загального часу процесу на рівні інтервали. В кожному з цих інтервалів обчислюються усереднені значення температур. Ці значення розміщуються в центральних точках кожного інтервалу. Кожна точка сполучається горизонтальною лінією з попередньою точкою і похилою лінією з наступною для одержання кускової лінеаризації. Цей згладжений профіль може застосовуватися для промислових цілей.

Другий метод кодування запропоновано в [51], де температурний профіль параметризується в кількох лінійних сегментах із змінною тривалістю. Цей метод дозволяє отримувати слабоградієнтні температурні профілі без необхідності додаткового згладжування спеціальними процедурами. В даному методі час процесу  $t \in [0, t_{\max}]$  поділяється на  $N$  інтервалів  $[t_{i-1}, t_i]$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ ,  $t_0 = 0$ ,  $t_N = t_{\max}$ , на межових точках кожного інтервалу задано значення температури  $[T_{i-1}, T_i]$ , де  $t_i$  – значення  $i$ -того дискрету часу в годинах,  $T_i$  – значення температури середовища в градусах Цельсія.

В межах кожного інтервалу значення температури в проміжку між межовими точками описуються лінійними функціями. Причому на останньому інтервалі температура вважається постійною, тобто  $T_N = T_{N-1}$ . Температурний профіль представляється у вигляді вектора з  $2N - 1$  елементів

$$\vec{T} = (\tau_1, \dots, \tau_{N-1}, \tau_N, \dots, \tau_{2N-1}) = (\Delta t_1, \Delta t_2, \dots, \Delta t_{N-1}, T_0, T_1, \dots, T_{N-1}). \quad (1.21)$$

Перші  $N - 1$  компонент вектора (1.21) означають тривалості  $N$  інтервалів  $\{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{N-1}\} = \{\Delta t_1, \Delta t_2, \dots, \Delta t_{N-1}\}$ , де  $\Delta t_i = t_i - t_{i-1}$  – тривалість  $i$ -того інтервалу в годинах,  $i = 1, 2, \dots, N$ . Наступні  $N$  компонент вектора (1.21) задають значення

температури на межових точках інтервалів в градусах Цельсія  $\{\tau_N, \tau_{N+1}, \tau_{N+2}, \dots, \tau_{2N-1}\} = \{T_0, T_1, T_2, \dots, T_{N-1}\}$ . Ілюстрацію представлення температурного профілю для  $N = 5$  наведено на рис. 1.2.

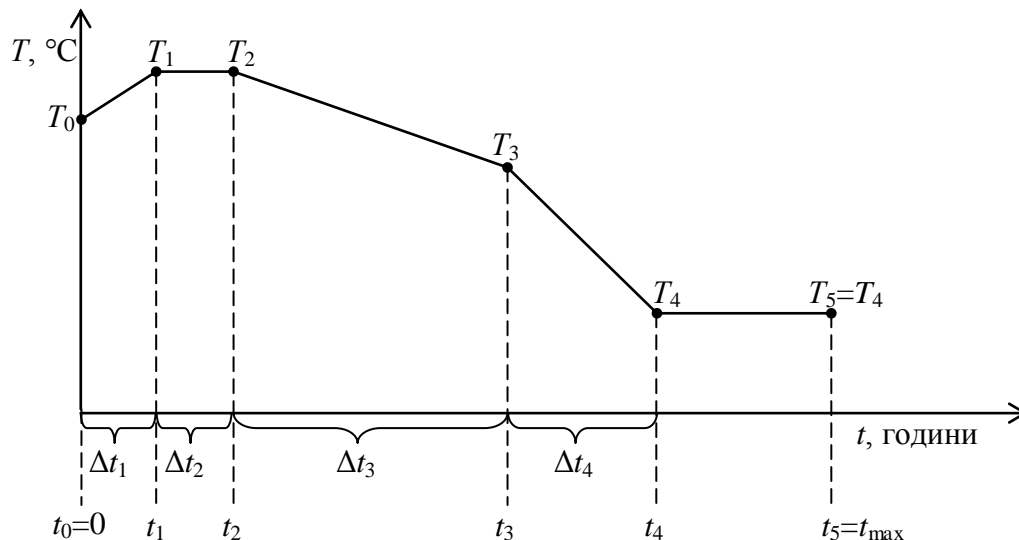


Рис. 1.2. Ілюстрація способу параметризації температурного управління

В [51] проаналізовано обидва методи кодування температурного профілю і показано, що результати, одержані при застосуванні останнього не тільки не вимагають додаткових процедур згладжування але й мають кращі характеристики на виконання критеріїв (1.19) та обмежень (1.20) задачі. Тому для подальших досліджень слід рекомендувати саме другий метод параметризації температурного профілю.

При виборі оптимізаційного алгоритму для розв'язку задачі (1.19), (1.20) перш за все необхідно визначитися з підходом до обробки векторної функції мети (1.19). Тут можливі два підходи. Перший дозволяє звести задачу до однокритеріальної без обмежень шляхом введення агрегуючої функції по критеріях  $f_1, f_2$  (1.19) та штрафної функції на забезпечення виконання умови (1.20). Другий підхід вимагає застосування методів багатокритеріальної оптимізації. В літературі присутні приклади реалізації як одного так і другого підходу. Зокрема в роботах Андре-Торо, 1997 р. [53], Каррілло-Урети, 2001 р. [62] та Ксьао Жі, 2004 [125] цю задачу розв'язано різними методами

однокритеріальної оптимізації, а в роботі Андре-Торо, 2004 р. [51] – методом багатокритеріальної оптимізації.

Задача (1.19), (1.20) як в однокритеріальній так і в багатокритеріальній постановці характеризується великою кількістю локальних екстремумів, тому градієнтні методи оптимізації виявляються непридатними для її розв'язання [62]. В роботі Андре-Торо, 1997 р. [53] було випробувано кілька методів однокритеріальної оптимізації: прямий пошук, метод динамічного програмування та генетичний алгоритм. Одержані там результати свідчать, що серед перерахованих методів генетичний алгоритм володіє найкращими характеристиками збіжності та найменшими обчислювальними затратами при розв'язку даної задачі.

Генетичні алгоритми – це стохастичні пошукові алгоритми, які базуються на механізмах природного добору і спадковості. Вони реалізують еволюційний принцип „виживання” найкращих розв'язків задачі [85]. Генетичний алгоритм відноситься до класу ітераційних. Ітерацію генетичного алгоритму прийнято називати генерацією. В результаті кожної генерації утворюється множина розв'язків задачі – популяція хромосом [43, 102].

Побудова генетичного алгоритму вимагає проведення наступних кроків: 1. параметризації температурного профілю у стрічні генів, що утворює хромосому, 2. побудови процедури формування початкової популяції хромосом, 3. реалізації генетичних операторів: оцінювання пристосованості, селекції, схрещування та мутації хромосом, 4. побудови процедури забезпечення виконання обмежень задачі (1.20) та відбору множини Парето-оптимальних розв'язків.

В роботі Каррілло-Урети за 2001 р. [62] отримав подальший розвиток метод розв'язку аналізованої задачі на основі однокритеріального генетичного алгоритму. Там запропоновано методику експериментального вибору параметрів генетичного алгоритму: початкової кількості хромосом від 100 до 1500, проценту плідності популяції (*generation gap percentage*) від 50 % до 80 %, ймовірностей і процедур схрещування та мутації, а також максимальної кількості ітерацій пошуку. Це дозволило поліпшити значення агрегованої функції мети на 4.00 %

[62]. В роботі Ксьао Жі за 2004 р. [125] досліджено використання однокритеріального еволюційного алгоритму за типом “Мурашник” (Ant colony system) [71] для розв’язання даної задачі, що дозволило дещо покращити значення агрегованої функції мети до 4.10 %.

Таким чином в згаданих вище підходах до розв’язання задачі (1.19), (1.20) використано процедуру агрегування критеріїв задачі  $f_1, f_2$  до скалярної функції мети та однокритеріальні алгоритми стохастичної оптимізації – однокритеріальні генетичні алгоритми. Однак в роботі Андре-Торо за 2004 р. [51] показано, що підхід із використанням агрегуючої функції не дозволяє одержати найкращий результат. Це пов’язано з труднощами у побудові адекватної процедури згортання критеріїв внаслідок великої кількості локальних екстремумів, що відповідає класу задач, досліджених в [68]. Крім того критерії задачі взаємосуперечні, що унеможлиблює знаходження її єдиного розв’язку. Це пояснюється тим, що існує протиріччя між мінімізацією критеріїв  $f_1, f_2$ , для чого температуру необхідно зменшувати та забезпеченням бажаної інтенсивності основного продукту, для чого потрібне підвищення температури. Тому актуальними є дослідження методів розв’язання цієї задачі за допомогою багатокритеріальних оптимізаційних алгоритмів. Їхньою головною перевагою є те, що вони формують Парето-множину рівноцінних розв’язків, серед яких користувач може вибрати той, який найкраще підходить в конкретній ситуації [63].

В літературі описано велику кількість підходів до розв’язання оптимізаційних задач в багатокритеріальній постановці. Зокрема в [89] описано метод отримання множини Парето-оптимальних розв’язків багатокритеріальної оптимізаційної задачі на основі однокритеріальних оптимізаційних алгоритмів з динамічною зміною ваг при зортанні критеріїв. Однак цей підхід вимагає розв’язання послідовності окремих однокритеріальних задач шляхом багаторазового виконання процедури пошуку. Це утруднює формування Парето-оптимальної множини, оскільки ці розв’язки часто мажорують один одного, а також призводить до значної тривалості виконання процедури пошуку [69].

На відміну від цього підходу багатокритеріальні генетичні алгоритми проводять пошук одночасно великої множини допустимих розв'язків оптимізаційної задачі, на основі яких можна отримати наближення множини Парето-оптимальних розв'язків при однократному виконанні процедури пошуку [126].

В роботі [126] описано різні підходи до побудови багатокритеріальних генетичних алгоритмів. Перший практичний підхід до розв'язку задач багатокритеріальної оптимізації за допомогою генетичного алгоритму з векторною оцінкою (Vector Evaluated Genetic Algorithm) описано в роботах Шаффера [115, 116]. Також є кілька інших версій генетичних алгоритмів, в яких робиться спроба генерувати множину немажоровних розв'язків. Тут варто відзначити роботи Формана [77], Курсави [92], Хажела та Ліна [84]. Проте в жодному з цих підходів не застосовано безпосередні принципи визначення Парето-оптимальності.

Метод оцінювання пристосованості хромосом-розв'язків на основі принципів Парето-оптимальності вперше запропонований Голдбергом [82]. Він полягає у встановленні однакових ймовірностей селекції всіх немажоровних розв'язків популяції шляхом ранжування. Ранжування відбувається таким чином: частині розв'язків популяції, що не домінують один над одним присвоюється ранг 1, на наступному етапі у множині неранжованих розв'язків виділяється підмножина невідоміантних і їм присвоюється ранг 2 і так далі, поки всі розв'язки популяції не будуть проранжовані.

Фонсеца та Флемінг [76] запропонували іншу схему ранжування, де ранг розв'язку відповідає кількості тих розв'язків які він мажорує. Таким чином немажорні розв'язки одержують той самий ранг, тоді як мажорні ранжуються у відповідності до густини популяції на відповідній області компромісних розв'язків. Цей підхід було апробовано в [59] на задачах оптимізації проектів розподілених охоронних систем.

В роботі [120] побудовано аналогічні процедури сортування і оцінювання пристосованості, але на базі схеми ранжування Голдберга. Хорн та інші [86] запропонували „нішовий” Парето-генетичний алгоритм (NPGA), де використо-



вугється метод турнірної селекції на основі Парето-мажорності. Серед останніх робіт слід відзначити [70], де вдосконалено алгоритм [120], а також так званий інтенсивний Парето еволюційний алгоритм (SPEA), розроблений в [129].

В роботі Андре-Торо за 2004 р. [51] досліджено використання багатокритеріального генетичного алгоритму для розв'язку задачі (1.19), (1.20) на основі методу оцінювання пристосованості Фонсеци та Флемінга [76]. Даний алгоритм в процесі свого функціонування згенерував наближення Парето-множини, яка складається з 90 рівноцінних розв'язків задачі. З цієї множини можна обрати найкращий для управління в конкретній ситуації. Однак задача вибору складає самостійну проблему, алгоритму вирішення якої в [51] не запропоновано.

Розглянуті в даному параграфі підходи до синтезу управління ХТП з мінімальними інтенсивностями побічних продуктів передбачають визначеність модельних коефіцієнтів. Це можливо лише в умовах спеціально організованих лабораторних досліджень (за умов повної спостережуваності параметрів процесу), як було показано в попередньому параграфі. Тому їхнє використання в промислових умовах, де присутній значний вплив невизначеності, утруднене. Причини невизначеності та методи її врахування за допомогою адаптивної нечіткої моделі наведено в третьому розділі. На основі цієї моделі побудовано метод синтезу управління ХТП з мінімальними побічними продуктами в умовах невизначеності технологічних процесів. Крім того побудовано спеціальну процедуру вибору оптимального в Парето-множині розв'язку задачі, яка враховує як об'єктивні характеристики розхилу значень критеріїв задачі так і задані користувачем відносні пріоритети. Чисельні результати апробації запропонованих підходів на задачах моделювання процесів броварного бродіння наведено в параграфах 4.3 та 4.4.

#### **1.4. Висновки першого розділу**

1. Розглянуто теоретичні основи моделювання хіміко-технологічних систем (ХТС) та класифікації їхніх динамічних моделей. Проведено порівняльний аналіз методів ідентифікації моделей ХТС. Описано проблеми

ідентифікації внаслідок неповної спостережуваності і невизначеності динаміки систем. Вказано переваги адаптивних моделей у випадку дослідження широких інтервалів невизначеності.

2. Описано особливості ХТС класу Моно-Ієрусалимського і досліджено характер невизначеності їхньої динаміки. Досліджено специфіку задачі моделювання систем в умовах неповноти вхідної інформації, нестационарності та просторово-часової самоорганізації.

3. Розглянуто сімейство зосереджених точкових моделей, що використовуються для моделювання часткових реалізацій процесу і служать основою для врахування невизначеності. Вказано роль моделей зворотнього зв'язку з продуктом.

4. Описано властивості існуючих адаптивних моделей динаміки ХТС з періодичним і неперервним режимом. Розглянуто напрямки їх подальшого розвитку на основі багатопараметричної адаптації, що дозволить оцінювати всі компоненти вектора стану системи.

5. Описано точкові моделі побічних продуктів і формалізовано задачу синтезу управління хіміко-технологічним процесом з їх мінімальними інтенсивностями. Здійснено порівняльний аналіз методів її розв'язання. Вказано на ефективність використання еволюційних методів багатокритеріальної оптимізації і параметризації температурного профілю в лінійних сегментах із змінною тривалістю.

## РОЗДІЛ 2

### МЕТОДИ ІДЕНТИФІКАЦІЇ ТОЧКОВИХ МОДЕЛЕЙ ЧАСТКОВО СПОСТЕРЕЖУВАНИХ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ

Індивідуальність технологічних процесів вимагає параметричної ідентифікації сімейства термодерованих моделей ХТС (2.48), (1.12)–(1.16) за результатами спостережень їх динаміки. Оскільки в більшості промислових виробництв спостереження за ходом процесу ведуться лише через вимірювання концентрації субстрату  $S(t)$ , а концентрації мікроорганізмів  $X(t)$  та продукту  $P(t)$  є неспостережуваними змінними стану [91, 99, 123], то ідентифікацію необхідно проводити лише за відомими траєкторіями змінної  $S(t)$ . Задача ідентифікації за умови неспостережуваності динаміки мікроорганізмів  $X(t)$  містить значні труднощі, які посилюються суттєвою нелінійністю термодерованих моделей. Тому на початковому етапі їх дослідження доцільно розглядати задачі ідентифікації простіших автономних аналогів, параметри яких служать хорошим початковим наближенням для задач ідентифікації моделей із керуванням.

#### 2.1. Методи ідентифікації автономних моделей ХТС з неспостережуваною змінною стану концентрації мікроорганізмів

Автономні моделі – це окремий клас моделей систем, на поведінку яких не впливають зовнішні управляючі впливи. Вони піддаються впливу лише початкових умов. Параметрична ідентифікація сімейства автономних моделей ХТС (1.9), (1.10), (1.12)–(1.16) полягає в оцінюванні невідомих значень модельних коефіцієнтів  $A_1 \div A_7$ . Нехай  $S_{sim}(\vec{P}, t_i) = S(t_i)$  – модельна оцінка концентрації субстрату в дискретному вузлі часу  $t_i$ ,  $i = \overline{0, N}$ , яка є розв'язком системи (1.9), (1.10) при встановленні модельних коефіцієнтів відповідно до вектора

$$\vec{P} = (A_1 \quad A_2 \quad \dots \quad A_7)^T. \quad (2.1)$$

Тоді оцінювання невідомих значень коефіцієнтів  $A_1 \div A_7$  можна записати у вигляді оптимізаційної задачі з функцією мети, що дорівнює сумі квадратів похибок по спостережуваній траєкторії концентрації субстрату  $S_{real}(t_i)$

$$F_1(\vec{P}) = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N [S_{sim}(\vec{P}, t_i) - S_{real}(t_i)]^2 \rightarrow \min, \quad (2.2)$$

де  $S_{real}(t_i)$ ,  $i = \overline{0, N}$  – експериментально спостережувана траєкторія змінної стану концентрації субстрату  $S(t)$ ,  $N+1$  – кількість експериментальних спостережень концентрації субстрату, включаючи спостереження в першій точці при  $t = 0$ .

Пряме розв'язання задачі параметричної ідентифікації методом найменших квадратів по цільовій функції (2.2) неможливе у зв'язку з тим, що аналітичний розв'язок нелінійної системи диференціальних рівнянь (1.9) невідомий [50]. Безпосереднє застосування градієнтних оптимізаційних алгоритмів по функції мети (2.2) ускладнюється їх слабкою збіжністю. Після додаткового аналізу системи (1.9) виявлено наступні причини цього явища: сильна залежність збіжності процедур уточнення значень ідентифікованих коефіцієнтів від їхнього початкового наближення, виродження задачі в некоректну внаслідок неспостережуваності змінної  $X(t)$  і відсутності обмежень на коефіцієнти  $A_1 \div A_7$ , які повинні бути додатними згідно природи явища.

Для усунення некоректності задачі враховано, що в промислових умовах можна отримати наближену експериментальну оцінку  $X_{real}^*$  максимального значення для неспостережуваної траєкторії концентрації мікроорганізмів  $X^*$ . На цій основі введемо в функцію мети регуляризуючий доданок, що дорівнює квадрату різниці між експериментальним і модельним значеннями максимальної концентрації мікроорганізмів  $X^*$

$$F_2(\vec{P}) = [X_{sim}^*(\vec{P}) - X_{real}^*]^2, \quad (2.3)$$

де  $X_{sim}^*(\vec{P}) = \sup_{t \in [t_0, t_N]} X(t)$  при встановлені параметрів системи (1.9), (1.12)–(1.16)

відповідно до вектора параметрів (2.1).

Результуючий функціонал задачі параметричної ідентифікації складається з суми функцій мети (2.2) та (2.3) зваженої регуляризуючим параметром  $\alpha$

$$F_1(\vec{P}) + \alpha F_2(\vec{P}) \xrightarrow{\vec{P}} \min. \quad (2.4)$$

Для забезпечення невід'ємності коефіцієнтів моделі використано метод дзеркального відображення від'ємних оцінок значень коефіцієнтів в додатні у процедурі обчислення функції мети

$$A_i = |P_i|, \quad i = \overline{1,7}, \quad (2.5)$$

де  $P_i$  – значення  $i$ -того коефіцієнту, що обчислюється алгоритмом ідентифікації.

В ході виконання процедури ідентифікації спостерігається явище жорсткості системи (1.9), (1.12)–(1.16), тому для її чисельного розв'язку можна ефективно використовувати відомі методи інтегрування жорстких систем звичайних диференціальних рівнянь, такі як метод Розенброка [117] та дробово-раціональні методи Р. В. Слоневського [44].

Для усунення сильної залежності результатів і якості ідентифікації від початкового наближення побудовано спеціальну процедуру обчислення початкового наближення значень параметрів. Ця процедура базується на допущеннях, які було одержано внаслідок аналізу типових траєкторій концентрації субстрату та мікроорганізмів, які наведено на рис. 2.1. На момент часу  $t = t^*$  концентрація мікроорганізмів дорівнює максимальній (див. рис. 2.1 (а))

$$X(t^*) = X^*, \quad X'(t^*) = 0, \quad (2.6)$$

а на момент часу  $t = 0.5t^*$  концентрація мікроорганізмів близька до половини

від максимальної

$$X(0.5t^*) = 0.5X^*. \quad (2.7)$$

Як видно із характеру графіка типової траєкторії концентрації субстрату (див. рис. 2.1 (б)) на відрізку  $[0, t^*]$  відбувається прискорене споживання субстрату, а при  $t > t^*$  – сповільнене. Тут  $t^*$  – точка перегину кривої концентрації субстрату, тобто  $S''(t^*) = 0$ . В околі точки  $t^*$  швидкість споживання максимальна і близька до постійної ( $S''(t^*) = 0$ ). Як бачимо, має місце симетричний розвиток процесу від прискорення до сповільнення, причому  $t^*$  є межевою точкою цих ділянок.

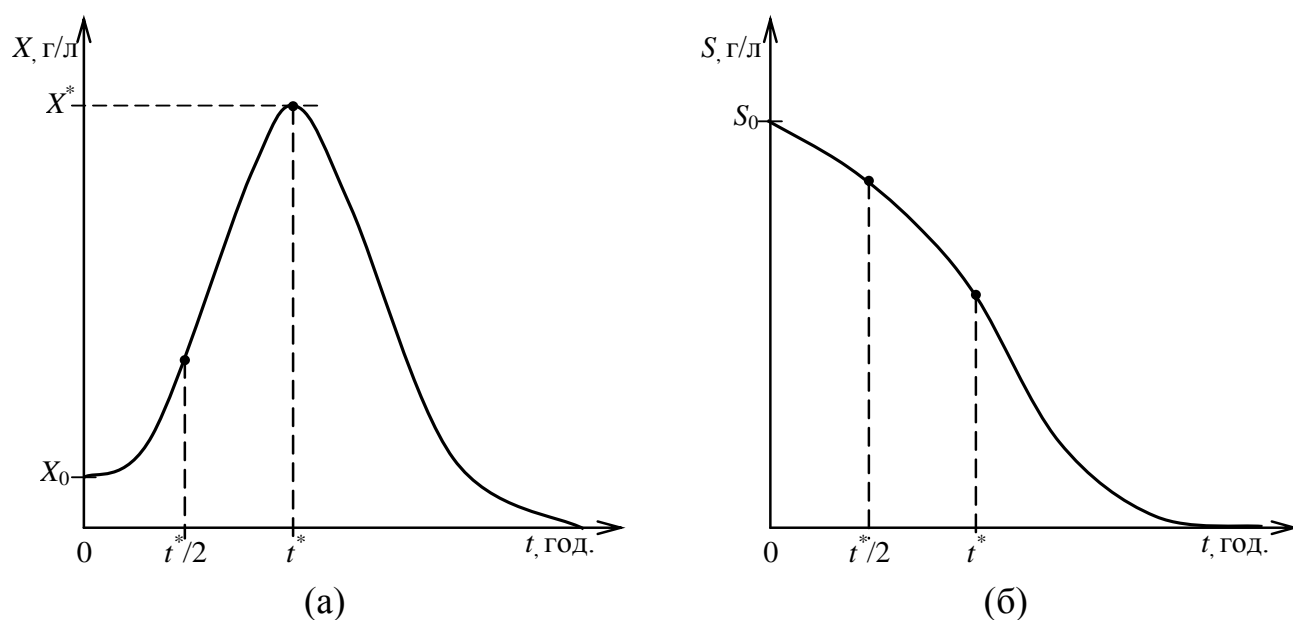


Рис. 2.1. Типові траєкторії концентрації (а) мікроорганізмів  $X(t)$  та (б) субстрату  $S(t)$  в періодичному реакторі

В даному процесі концентрація субстрату міняється від максимальної до нульової. Тому, за відсутності іншої інформації, природно вважати, що зміна характеру процесу настає після зменшення початкової концентрації до половинної

$$S(t^*) = 0.5S_0, \quad (2.8)$$

а на момент  $t = 0.5t^*$  споживається приблизно  $1/4$  активних вуглеводів субстрату

$$S(0.5t^*) = 0.75S_0. \quad (2.9)$$

Виходячи з допущення (2.8) визначається і сам момент  $t^*$ . Для цього траєкторія концентрації субстрату  $S_{real}(t_i)$ ,  $i = \overline{0, N}$  апроксимується кубічною параболою  $S_{approx}(t) = a_0 + a_1t + a_2t^2 + a_3t^3$  методом найменших квадратів. Після чого момент  $t^*$  можна наближено знайти за формулою

$$t^* \approx \arg \min_{\tau_i \in \{\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_K\}} |S_{approx}(\tau_i) - 0.5S_0|, \quad (2.10)$$

шляхом перебору значень аргументу апроксимаційної функції  $\tau_i$  на множині дискретних вузлів  $[\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_K]$ , що покривають з достатньою точністю інтервал  $[t_0, t_N]$ . Для більшості ферментаційних процесів, зважаючи на їх довготривалість, достатня точність досягається розбиттям інтервалу  $[t_0, t_N]$  на вузли  $\tau_i$ ,  $i = \overline{0, K}$ , відстань між якими дорівнює одній годині  $\tau_{i+1} - \tau_i = 1$ ,  $i = \overline{1, K}$ .

Користуючись різницевиими співвідношеннями по експериментальних даних можна наближено оцінити значення похідних концентрації субстрату в час  $t = t^*$  та концентрації мікроорганізмів в час  $t = 0.5t^*$

$$S'(t^*) \approx \frac{S_{real}(t_{i+1}) - S_{real}(t_{i-1})}{t_{i+1} - t_{i-1}}, \quad i = \arg \min_{i=0,1,\dots,N} |t_i - t^*|, \quad (2.11)$$

$$X'(0.5t^*) \approx \frac{X^* - X_0}{t^*}. \quad (2.12)$$

Експериментальні дослідження показують прямо пропорційну залежність між швидкістю споживання субстрату та концентрацією мікроорганізмів, тобто значення коефіцієнта  $A_4$  близьке до нуля (див. (1.9)). Присутність  $A_4$  необхідна для забезпечення прямування до нуля швидкості зміни концентрації субстрату,

коли сама концентрація прямує до нуля. Для зручності оцінювання коефіцієнт  $A_4$  нормуємо початковою концентрацією субстрату

$$A_4 = kS_0, \quad (2.13)$$

де  $k$  – деякий коефіцієнт пропорційності.

Враховуючи допущення (2.8) та (2.13) з другого диференціального рівняння системи (1.9) отримуємо

$$S'(t^*) = -\frac{A_3 0.5S_0}{(k + 0.5)S_0} X^*,$$

$$A_3 = -\frac{(2k + 1)S'(t^*)}{X^*}. \quad (2.14)$$

З метою оцінювання коефіцієнтів  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_5$  та  $A_6$  необхідно проаналізувати перше диференціальне рівняння системи (1.9), яке має специфічний вираз для кожної моделі продуктного інгібування (1.12)–(1.16).

Перше диференціальне рівняння системи (1.9) для моделі Моно-Хіншельвуда (1.12) має вигляд

$$X'(t) = \frac{A_1 S(t) X(t)}{A_4 + S(t)} \left( 1 - \frac{P(t)}{A_5} \right) - A_2 X(t). \quad (2.15)$$

Оцінимо співвідношення між коефіцієнтами  $A_1$  та  $A_2$ , проаналізувавши диференціальне рівняння (2.15) при  $t \rightarrow t^*$

$$X'(t^*) = \frac{A_1 0.5S_0 X^*}{A_4 + 0.5S_0} \left( 1 - \frac{P(t^*)}{A_5} \right) - A_2 X^* = 0. \quad (2.16)$$

Згідно з формулою (1.11) отримаємо

$$P(t^*) = 0.25S_0. \quad (2.17)$$



Для коефіцієнту  $A_5$  пропонується встановити значення максимально можливої концентрації основного продукту, що може утворитися в результаті реакції (див. (1.11)), тобто

$$A_5 = 0.5S_0. \quad (2.18)$$

Оскільки максимальна концентрація мікроорганізмів  $X^* \neq 0$ , то після ділення рівняння (2.16) на  $X^*$  і підстановки (2.17), (2.18) та (2.13) отримуємо

$$\frac{A_1 0.5S_0}{(k + 0.5)S_0} \left(1 - \frac{S_0}{4A_5}\right) - A_2 = 0, \quad (2.19)$$

$$A_2 = \frac{A_1}{2k + 1} \left(1 - \frac{S_0}{2S_0}\right), \quad (2.20)$$

$$A_2 = \frac{A_1}{4k + 2}. \quad (2.21)$$

З метою оцінювання значення коефіцієнту  $A_1$  проаналізуємо диференціальне рівняння (2.15) при  $t \rightarrow 0.5t^*$ , застосувавши допущення (2.9) про те, що до цього моменту було спожито одну четверту активних вуглеводів субстрату

$$X'(0.5t^*) = \frac{A_1 0.75S_0 X(0.5t^*)}{(k + 0.75)S_0} \left(1 - \frac{P(0.5t^*)}{0.5S_0}\right) - A_2 X(0.5t^*) \quad (2.22)$$

Згідно з формулою (1.11) отримуємо  $P(0.5t^*) = \frac{1}{8}S_0$  і тоді

$$X'(0.5t^*) = \frac{A_1 0.75X(0.5t^*)}{k + 0.75} \left(1 - \frac{1}{4}\right) - A_2 X(0.5t^*), \quad (2.23)$$

а після підстановки (2.21) та деяких перетворень

$$A_1 = \left[ \frac{3X(0.5t^*)0.75}{(4k + 3)X'(0.5t^*)} - \frac{X(0.5t^*)}{(4k + 2)X'(0.5t^*)} \right]^{-1}. \quad (2.24)$$

Похідну  $X'(0.5t^*)$  можна наближено оцінити за формулою (2.12), а концентрацію мікроорганізмів в час  $t \rightarrow 0.5t^*$  можна вважати рівною половині від екстремальної (2.7).

Таким чином формули (2.24), (2.21), (2.14), (2.13) дозволяють отримати початкові наближення коефіцієнтів моделі Моно-Хіншельвуда.

Оскільки в моделі Моно-Ієрусалимського (1.13) коефіцієнти  $A_4$  та  $A_5$  виконують схожу роль, то аналогічно до (2.13) можна покласти

$$A_4 = A_5 = kS_0. \quad (2.25)$$

Користуючись підходом, аналогічним до того, який використано раніше, для моделі Моно-Ієрусалимського отримаємо

$$A_1 = \left[ \frac{3X(0.5t^*)}{X'(0.5t^*)4S_0 \left( k^2 + \frac{7}{8}k + \frac{3}{32} \right)} - \frac{X(0.5t^*)}{X'(0.5t^*)2S_0 \left( k^2 + 0.75k + \frac{1}{8} \right)} \right]^{-1}, \quad (2.26)$$

$$A_2 = \frac{A_1 0.5S_0}{[kS_0 + 0.5S_0][kS_0 + 0.25S_0]} = \frac{A_1}{2S_0 \left( k^2 + 0.75k + \frac{1}{8} \right)}. \quad (2.27)$$

Модель Моно-Бергтера (1.14) при підстановці  $A_5 = A_6 = 1$  аналогічна до рівняння Моно-Ієрусалимського (1.13) при  $A_5 = 1$ . Тому для початкового оцінювання її коефіцієнтів скористаємося тим самим підходом і отримаємо

$$A_1 = \left[ \frac{3X(0.5t^*)}{(k + 0.75)(4 + 0.5S_0)X'(0.5t^*)} - \frac{X(0.5t^*)}{(k + 0.5)(2 + 0.5S_0)X'(0.5t^*)} \right]^{-1}, \quad (2.28)$$

$$A_2 = \frac{A_1}{2k + 0.5kS_0 + 0.25S_0 + 1}. \quad (2.29)$$

Для оцінювання коефіцієнтів модифікованої моделі Моно-Хіншельвуда (1.15) покладемо коефіцієнт  $A_6 = 1$  і використаємо формули (2.24),

(2.21), (2.18), які виведено для класичної моделі Моно-Хіншельвуда.

В моделі Моно-Торо (1.16) автори [52, 62] прийняли допущення, що коефіцієнт  $A_5$  дорівнює половині від початкової концентрації субстрату  $A_5 = 0.5S_0$ , що відповідає оцінці кінцевої концентрації основного продукту в спиртовому бродінні.

Згідно описаного підходу, для моделі Моно-Торо отримаємо

$$A_1 = \frac{15X'(0.5t^*)}{8X(0.5t^*)}, \quad (2.30)$$

$$A_2 = \frac{2}{3} A_1. \quad (2.31)$$

Після обчислення початкових оцінок значень коефіцієнтів  $A_1, A_2, \dots, A_7$  необхідно провести їх уточнення з використанням оптимізаційних методів. Зважаючи на те, що процедура уточнення є оптимізаційною задачею високої розмірності, можна допустити доцільність її розбиття на послідовність підзадач з меншою розмірністю. Для побудови ефективної схеми розбиття потрібно прийняти до уваги, що наближення значень коефіцієнтів  $A_3$  і  $A_4$  досить точні, оскільки базуються на оцінках динаміки спостережуваної траєкторії  $S(t)$ , див. допущення (2.8)–(2.11), тоді як початкові оцінки значень коефіцієнтів  $A_1$  та  $A_2$  побудовані на основі дуже приблизних допущень про динаміку неспостережуваної траєкторії  $X(t)$ , див. (2.6), (2.7), (2.12) а отже потребують першочергового уточнення. Крім того, коли відношення  $X^*/X_0$  достатньо великі, тобто присутні великі градієнти  $X(t)$ , то вплив регуляризуючого доданку (2.3) (відхилення між модельною та експериментальною оцінками максимальної концентрації мікроорганізмів  $X^*$ ) функції мети (2.4) посилюється, що може покращити збіжність процедури уточнення коефіцієнтів  $A_1$  та  $A_2$ .

Враховуючи висловлені міркування можна зробити припущення, що в процедурі уточнення значень модельних коефіцієнтів доцільною є наступна

схема розбиття загальної задачі ідентифікації. На першому етапі уточнюються значення параметрів  $A_1$  та  $A_2$ , оскільки їх початкові наближення базуються на дуже приблизних оцінках динаміки неспостережуваної змінної стану  $X(t)$ . На другому етапі оцінюються значення параметрів  $A_3$  і  $A_4$ , початкові наближення яких точніші, оскільки базуються на оцінках динаміки спостережуваної змінної стану  $S(t)$ . На завершальному етапі відбувається додаткове сукупне уточнення значень всіх коефіцієнтів  $A_1, A_2, \dots, A_7$ .

Альтернативною до запропонованої схеми можна вважати просту схему ідентифікації без розбиття, тобто уточнення одразу всіх модельних коефіцієнтів. Доцільно провести дослідження задач параметричної ідентифікації точкових моделей сімейства Моно-Ієрусалимського на траєкторіях з різними значеннями градієнта  $X^*/X_0$ , що дозволило б рекомендувати ту чи іншу схему аналізу основної задачі для покращення характеристик збіжності у конкретному випадку.

В параграфі 4.2 наведені чисельні результати розв'язку багатьох задач ідентифікації як модельних так і промислових траєкторій. Також проведено аналіз отриманих результатів і виявлено ефект від використання побудованих процедур початкового оцінювання значень коефіцієнтів, функції мети, регуляризуючого параметра  $\alpha$  функції мети (2.4), методів оптимізації та висловлено рекомендації стосовно ефективності тієї чи іншої схеми розбиття задачі уточнення коефіцієнтів в конкретних умовах.

## **2.2. Методи ідентифікації керованих зворотнім зв'язком ХТС з неспостережуваною змінною стану концентрації субстрату**

На динаміку процесу періодичного культивування в системах Моно-Ієрусалимського впливає множина різноманітних вхідних сигналів, зокрема тиск в реакторі, лужність та температура субстрату. Лише частина цих вхідних сигналів піддаються спостереженню та (або) управлінню, вплив решти залишається невідомим [91, 97]. Задача ідентифікації моделей з керуванням

важча у порівнянні з задачею ідентифікації їх автономних аналогів. Тому при ідентифікації керованих моделей параметри ідентифікованих автономних систем можуть служити хорошим початковим наближенням. Розглянемо задачу ідентифікації двох випадків керованої системи Моно-Ієрусалимського: з керованим зворотнім зв'язком та терموкерованої.

Для ряду технологічних процесів періодичного культивування важливо враховувати розвиток побічних систем мікроорганізмів. В ході свого розвитку вони продукують домішки, які псують якість основного продукту, що називається його мікробіологічним інфікуванням. Воно відбувається у випадку, коли побічні системи мікроорганізмів розвиваються надто інтенсивно на будь-якій стадії процесу. Ризик інфікування особливо високий для процесів із низькою швидкістю перебігу, оскільки та система мікроорганізмів, яка адаптується швидше продовжує домінувати в даному середовищі, витісняючи інші [101].

Для усунення ризику інфікування в середовище вносять деякий об'єм основного продукту  $P(t) = P_0$  на початку процесу  $t = 0$ , що пригнічує розвиток побічних систем і дещо пригальмовує розвиток основної системи мікроорганізмів. Експериментально такі процеси досліджено в роботі [101], де побудовано модель затримки активного перебігу процесу, однак загальна модель його динаміки там не встановлена. В даному параграфі розроблено таку модель на основі сімейства автономних моделей (1.9), (1.12)–(1.16), що досліджувалися в попередніх параграфах. Розвиток згаданих моделей полягає у врахуванні ненульової початкової концентрації основного продукту, тобто початкової умови виду

$$X(0) = X_0, S(0) = S_0, P(0) = P_0, \quad (2.32)$$

де  $S_0$  – початкова концентрація субстрату,  $X_0$  – початкова концентрація мікроорганізмів,  $P_0$  – початкова концентрація основного продукту в періодичному реакторі.

Параметрична ідентифікація моделей Моно-Ієрусалимського з новою

початковою умовою (2.32) базується на методі ідентифікації автономних систем Моно-Ієрусалимського (1.9), (1.12)–(1.16) з неспостережуваною змінною стану, що докладно описано в попередньому параграфі та [32, 109].

Для врахування впливу додаткового об'єму основного виходу  $P_0$  на розвиток побічних систем мікроорганізмів в систему диференціальних рівнянь (1.9) включено функції Хевісайда, які моделюють затримку активного перебігу процесу (лаг-фазу)

$$\begin{cases} X'(t) = \gamma\{t - \lambda(P_0)\}(A_1 H_G[S(t), P(t)] - A_2)X(t), \\ S'(t) = -\gamma\{t - \lambda(P_0)\}A_3 \frac{S(t)}{A_4 + S(t)} X(t), \\ P'(t) = -A_7 S'(t). \end{cases} \quad (2.33)$$

де  $\lambda(P_0)$  – тривалість лаг-фази в залежності від початкової інтенсивності основного виходу,  $\gamma\{t\}$  – функція Хевісайда

$$\gamma\{t\} = \begin{cases} 1, & t \geq 0, \\ 0, & t < 0. \end{cases}$$

Тривалість лаг-фази моделюється за допомогою формули (2.34), ефективність якої доведено в [101]

$$\lambda(P_0) = \lambda_0 \left(1 - \frac{P_0}{P^*}\right)^n, \quad (2.34)$$

де  $\lambda_0$  – тривалість лаг-фази при відсутності початкового рівня основного продукту,  $n$  – коефіцієнт,  $P^*$  – критичний рівень інтенсивності продукту, при якому повністю припиняється розвиток системи мікроорганізмів.

Після параметричної ідентифікації модель дозволяє прогнозувати динаміку процесів. Однак експериментальні дослідження показують значну мінливість коефіцієнтів моделі  $A_1, A_2, A_3$  при різних значеннях початкової інтенсивності виходу  $P_0$ . Звідси постає задача побудови єдиної математичної моделі яка б

дозволила забезпечити адекватність і достатню точність прогнозування для широкого діапазону значень початкової інтенсивності  $P_0$ .

Для виявлення форми залежностей модельних коефіцієнтів від початкової інтенсивності основного продукту використано вибірку експериментальних вимірів, опубліковану в [101], яка включає п'ять траєкторій змінної стану  $X(t)$  системи мікроорганізмів класу *Brettanomyces* для ряду початкових інтенсивностей:  $P(0) = P_0 = \{0, 28.5, 59.2, 73.5, 85.9\}$  г/л., що зображено на рис. 2.2, де сусідні спостереження траєкторій концентрації мікроорганізмів сполучені прямими.

В праці [101] особливий акцент ставився на точності вимірювань для оцінювання динаміки саме траєкторій концентрації мікроорганізмів  $X(t)$ , тому відповідні до них траєкторії концентрації субстрату  $S(t)$  там не розглядаються, проте відомі їх початкові значення  $S(0) = S_0 = 320$  г/л. Звідси постає задача параметричної ідентифікації системи (2.33) по траєкторіях  $X(t)$

при неспостережуваності змінної  $S(t)$ . Така постановка є альтернативною до задачі, поставленої і розв'язаної в §2.1, де навпаки, неспостережуваною була змінна  $X(t)$ , а  $S(t)$  – спостережуваною. Задача параметричної ідентифікації системи (2.33) по спостереженнях  $X(t)$  записується як задача мінімізації функції

$$F_3(\vec{P}) = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N [X_{sim}(\vec{P}, t_i) - X_{real}(t_i)]^2 \rightarrow \min, \quad (2.35)$$

де  $X_{real}(t_i)$ ,  $i = \overline{0, N}$  – експериментально спостережувана траєкторія змінної

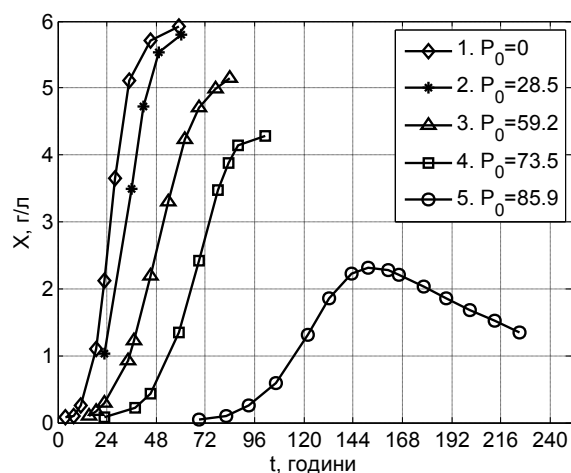


Рис. 2.2. Експериментальні дані для ідентифікації – траєкторії  $X(t)$  процесу при ряді початкових інтенсивностей продукту

концентрації мікроорганізмів  $X(t)$ ,  $N+1$  – кількість експериментальних спостережень концентрації мікроорганізмів, включаючи спостереження в першій точці при  $t=0$ ,  $X_{sim}(\vec{P}, t_i)$  – модельна оцінка концентрації мікроорганізмів в дискретному вузлі часу  $t_i$ ,  $i = \overline{0, N}$ , яка є розв'язком системи (1.9), (1.10) при встановленні коефіцієнтів  $A_1 \div A_7$  відповідно до вектора (2.1).

Коли в задачі ідентифікації з неспостережуваною змінною  $X(t)$  було необхідно проводити регуляризацію для усунення її некоректності (див. (2.3) та (2.4)), то задача ідентифікації з неспостережуваною змінною  $S(t)$  по функції мети (2.35) коректна і не вимагає додаткової регуляризації. Це пов'язане з гладкістю траєкторій  $S(t)$  та їх регулярним, монотонно спадним характером (див. рис. 2.1): починаючись від відомого початкового значення  $S(0) = S_0$  вони спадають до нуля за деякий скінченний відрізок часу  $S(t) \rightarrow 0$  при  $t \rightarrow t_{\max}$ , тому для достатньо точного їх відтворення вистарчає початкової оцінки  $S(0) = S_0$ , а також того, що спадання об'єму живих мікроорганізмів  $X(t) \rightarrow 0$  в періодичній системі – це наслідок спадання концентрації поживного субстрату  $S(t) \rightarrow 0$ . Останній факт опосередковано регуляризує задачу параметричної ідентифікації по функції мети (2.35).

Для обчислення початкового наближення коефіцієнтів  $A_1, A_2, \dots, A_7$  в задачі (2.35) використано ті ж самі принципи, що й для оцінювання коефіцієнтів в задачі (2.2)–(2.4), проте вони уточнені з врахуванням того, що відома повна траєкторія  $X(t)$ .

Основою для початкового оцінювання значень коефіцієнтів  $A_1, A_2, A_5, A_6$ , що мають відмінну роль для різних моделей сімейства Моно-Ієрусалимського, виступають співвідношення, що були виведені для відповідних моделей в параграфі 2.1. Проте, зважаючи на вплив керованого зворотнього зв'язку  $P_0$ , значення  $A_1$  вимагає додаткового уточнення, а саме



$$A_1\{P_0\} = A_1 \frac{S_0 + \frac{1}{A_7} P_0}{S_0} = A_1 [1 + P_0 / (A_7 S_0)], \quad (2.36)$$

де  $A_1$  – коефіцієнт, оцінений за співвідношеннями параграфу 2.1 для конкретної моделі сімейства Моно-Ієрусалимського,  $A_1\{P_0\}$  – його уточнене значення з врахуванням  $P_0 \neq 0$ ,  $A_7$  – коефіцієнт продуктного синтезу (скільки одиниць об'єму продукту  $P(t)$  утворюється в результаті реагування одиниці об'єму субстрату, див. (1.11)).

Формула (2.36) для уточнення коефіцієнта  $A_1$  виведена на основі припущення про те, що весь наявний на початку процесу об'єм продукту  $P(0) = P_0$  раніше був присутній в тому ж середовищі у вигляді субстрату. Для граничного випадку, коли початкова концентрація продукту в середовищі відсутня ( $P_0 = 0$ ), формула (2.36) дає наближення аналогічні до тих, що виведені в параграфі 2.1, тобто  $A_1\{P_0\} = A_1$ . Крім того, завдяки спостережуваності траєкторії концентрації мікроорганізмів  $X(t)$  можна обчислити точніші наближення коефіцієнтів  $A_1, A_2$  шляхом підстановки у відповідні співвідношення параграфу 2.1 оцінок максимальної концентрації мікроорганізмів  $X(t^*) = X^*$  та моменту часу  $t^*$ , в який вона спостерігається

$$t^* \approx t_{i^*} \quad \Big| \quad i^* = \arg \max_{i=0,1,\dots,N} X_{real}(t_i), \quad (2.37)$$

$$X(t^*) = X^* \approx \max_{i=0,1,\dots,N} X_{real}(t_i). \quad (2.38)$$

Для оцінювання значення  $X(0.5t^*)$  та похідної  $X'(0.5t^*)$  замість приблизних співвідношень (2.7) та (2.12) можна застосувати набагато точніші формули

$$X(0.5t^*) \approx X(t_{i^*/2}), \quad (2.39)$$

$$X'(0.5t^*) \approx \frac{X(t_{i^*/2+1}) - X(t_{i^*/2-1})}{t_{i^*/2+1} - t_{i^*/2-1}}, \quad (2.40)$$

де  $i^{*/2}$  – індекс часового дискрету  $t_{i^{*/2}}$ , що знаходиться найближче до моменту  $t = 0.5t^*$

$$i^{*/2} = \arg \min_{i=0,1,\dots,N} |0.5t^* - t_i|.$$

При оцінюванні значень коефіцієнтів  $A_3, A_4$  використано ті самі співвідношення, що й в параграфі 2.1 – (2.13) та (2.14). Проте в співвідношенні (2.14), зважаючи на неспостережуваність траєкторії  $S(t)$ , значення похідної  $S'(t^*)$  оцінюється не за формулою (2.11), а за приблизним співвідношенням

$$S'(t^*) \approx \frac{S(t^*) - S(0)}{t^*}, \quad (2.41)$$

Покладаючи, що до моменту  $t \rightarrow t^*$  споживається половина активних вуглеводів субстрату –  $S(t^*) = 0.5S_0$  та умову  $S(0) = S_0$  отримуємо

$$S'(t^*) \approx \frac{0.5S_0 - S_0}{t^*}. \quad (2.42)$$

Використання методу початкового оцінювання значень модельних коефіцієнтів та методу дзеркальних відображень (2.5) з врахуванням наведених вище уточнень (2.36)–(2.42) забезпечує збіжність процедури параметричної ідентифікації системи (2.33) для всіх наведених в [101] траєкторій  $X(t)$ .

В [105] встановлено, що залежність коефіцієнту  $A_2$  від  $P_0$  має експоненційний характер

$$A_2 \{P_0\} = \exp(b_3 + b_4 P_0). \quad (2.43)$$

Було висловлено припущення, що залежності  $A_1$  та  $A_3$  від  $P_0$  також є експоненційними. За допомогою описаного вище методу параметричної ідентифікації оцінено значення параметрів системи (2.33), (2.34) по всіх траєкторіях вибірки. Виявилось, що для трьох траєкторій з п'яти отримуємо неправдоподіб-

ні значення параметру  $A_2 \approx 0$ , що вироджують динаміку змінної стану  $X(t)$  в горизонтальні лінії після досягнення максимальної концентрації (відсутнє відмирання мікроорганізмів), що показано на рис. 2.3. Такий результат пов'язаний з неповнотою експериментальних спостережень динаміки відповідних траєкторій на завершальній стадії процесу. В той же час остання, п'ята траєкторія у вибірці, – при найбільшій інтенсивності виходу  $P_0 = P_{\max}$  – характеризується повнотою експериментальних спостережень протягом всього часу процесу, що дозволило встановити адекватні оцінки її параметрів.

Для оцінювання значень коефіцієнтів  $b_3, b_4$  в (2.43) необхідно мати оцінки коефіцієнта  $A_2$  хоча б для двох значень початкової інтенсивності  $P_0$ . Одне

значення  $A_2$  відоме за результатами параметричної ідентифікації п'ятої траєкторії при  $P_0 = P_{\max}$ , яка спостережується протягом всього часу процесу.

Для оцінювання правдоподібного значення другого невідомого параметру  $A_2$  при найменшій інтенсивності

виходу  $P_0 = P_{\min}$  застосовано два підходи: за відношенням між коефіцієнтами  $A_2$  та  $A_1$  в подібному

періодичному процесі культивування іншої системи мікроорганізмів – *Saccharomyces cerevisiae* при  $P_0 = P_{\min}$  [51] та добудувавши недостаючу останню

точку  $X(t_{\max})$  за відношенням між рівнем змінної стану концентрації мікроорганізмів  $X(t)$  в кінці процесу  $t = t_{\max}$  і піковим рівнем  $X(t^*) = X^*$  для повністю спостережуваної п'ятої траєкторії. Оцінка  $A_2$  для першого підходу –

$A_2\{P_{\min}\} = 0.003$ , за другим підходом –  $A_2\{P_{\min}\} = 0.002$ . Для контролю структурної стійкості побудованої математичної моделі вибрано також близьке до нуля

додатне значення оцінки  $A_2\{P_{\min}\} = 0.001$ . Враховуючи оцінки значень

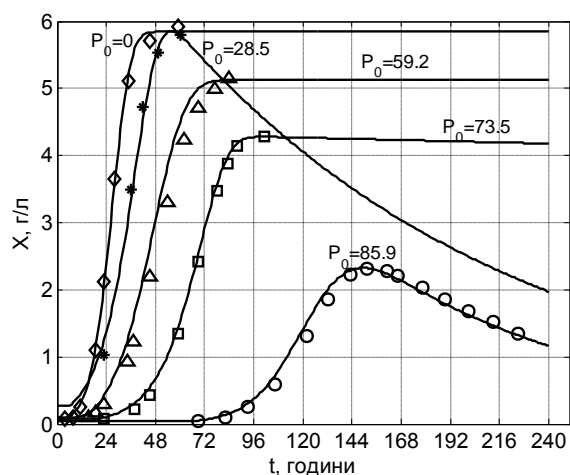
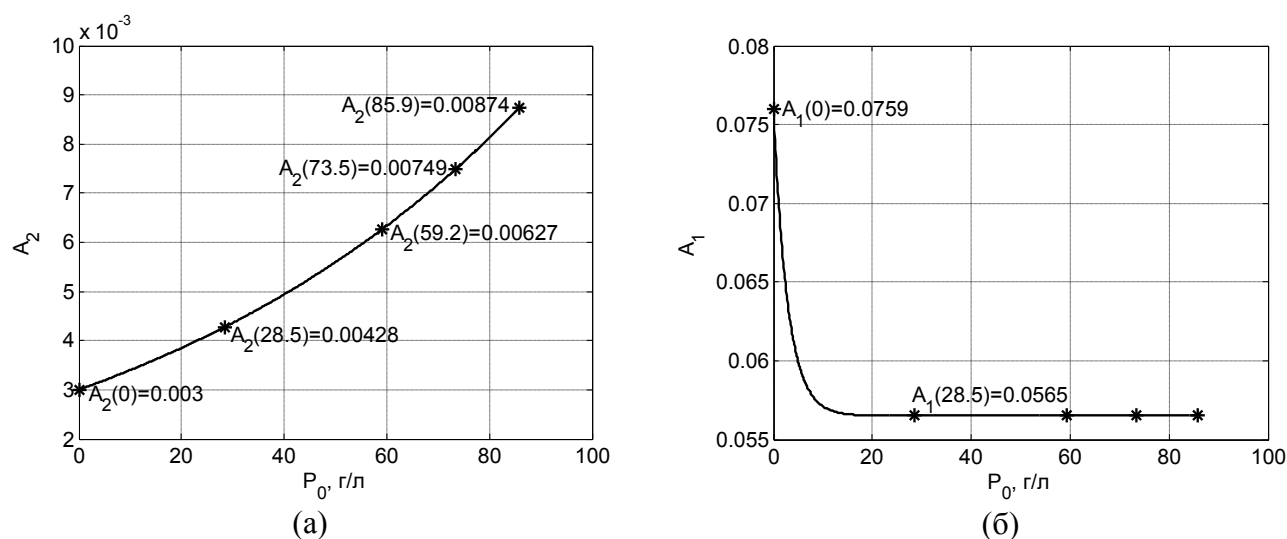


Рис. 2.3. Виродження динаміки трьох траєкторій внаслідок неповноти експериментальних даних

коефіцієнта  $A_2$  для межових траєкторій  $A_2\{P_{\min}\} = 0.003$  та  $A_2\{P_{\max}\}$  отримуємо залежність, вигляд якої показано на рис. 2.4 (а).



Залежність коефіцієнта  $A_2$  від  $P_0$ .

Залежність коефіцієнта  $A_1$  від  $P_0$ .

Рис. 2.4. Вигляд залежностей модельних коефіцієнтів  $A_1$  та  $A_2$  від  $P_0$

При включені залежності (2.43) в процедуру ідентифікації параметрів  $A_1$  та  $A_3$  помічено квазіпостійність значень  $A_1$ . Тільки для траєкторії  $P_0 = P_{\min}$  значення  $A_1$  суттєво відрізняється від решти. Така поведінка  $A_1$  адекватно моделюється експоненційною залежністю виду

$$A_1\{P_0\} = b_0 + \exp(b_1 + b_2 P_0), \quad (2.44)$$

що підтверджується рис. 2.4 (б). При поповненні попередньої процедури ідентифікації співвідношенням (2.44) спостерігався складний характер залежності коефіцієнта  $A_3$  від  $P_0$ . Її можна представити у вигляді трьох фаз: швидкого спадання, швидкого зростання та перехідної фази, див. рис. 2.5 (а). Така поведінка змодельована наступною трьохгілковою експоненціальною залежністю

$$A_3\{P_0\} = \begin{cases} \exp(b_5 + b_6 P_0 + b_7 P_0^2), & P_{\min} \leq P_0 \leq P_{\Lambda_1}, \\ \exp(b_8 + b_9 P_0 + b_{10} P_0^2), & P_{\Lambda_1} < P_0 \leq P_{\Lambda_2}, \\ \exp(b_{11} + b_{12} P_0 + b_{13} P_0^2), & P_0 > P_{\Lambda_2}. \end{cases} \quad (2.45)$$

Таким чином вплив  $P_0$  на коефіцієнти моделі визначається співвідношеннями (2.43)–(2.45). Для оцінок отриманих на основі значень  $A_2\{P_{\min}\} = \{0.001, 0.002\}$  побудовані аналогічні за формою залежності, що засвідчує структурну стійкість даної математичної моделі.

В табл. 2.1 наведені похибки ідентифікації параметрів по траєкторії змінної стану  $X(t)$  відносно пікового рівня  $X^*$  для трьох оцінок  $A_2\{P_{\min}\} = \{0.001, 0.002, 0.003\}$ , що обчислюються за формулою

$$X_{\text{std.err.}} = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N |X_{\text{sim}}(t_i) - X_{\text{real}}(t_i)| \cdot \frac{100\%}{X^*}, \quad (2.46)$$

де  $X_{\text{sim}}(t_i)$ ,  $X_{\text{real}}(t_i)$  – модельна та експериментальна оцінки змінної стану  $X(t)$  в  $i$ -тий дискрет часу,  $X^* = X(t^*)$  – піковий рівень змінної стану  $X(t)$ .

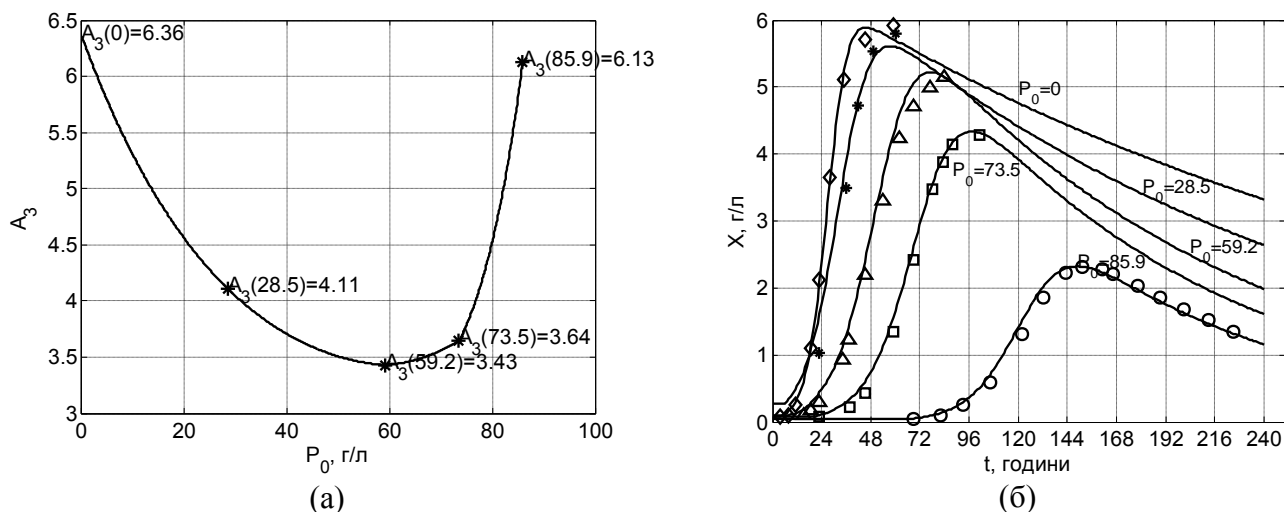
Таблиця 2.1

Відносні похибки оцінювання параметрів системи Моно-Іерусалимського з керованим зворотнім зв'язком

№	$P_0$	Оцінка $A_2\{P_{\min}\}$		
		0.001	0.002	0.003
1	$P_{\min} = 0.0$	1.17 %	1.37 %	1.58 %
2	$P_{\Lambda_0} = 28.5$	5.08 %	4.84 %	4.61 %
3	$P_{\Lambda_1} = 59.2$	3.78 %	3.58 %	3.41 %
4	$P_{\Lambda_2} = 73.5$	1.95 %	1.80 %	1.71 %
5	$P_{\max} = 85.9$	1.07 %	1.07 %	1.07 %

Максимальна відносна похибка оцінювання параметрів з використанням описаного методу складає 5.08 %, що має порядок похибки вимірювань (див. табл. 2.1). За критерієм мінімуму максимальної відносної похибки найточніші результати отримані для значення  $A_2\{P_{\min}\} = 0.003$ , що свідчить про його близькість до істинного значення параметра. На рис. 2.5 (б) наведено динаміку

модельних та експериментальних оцінок траєкторій змінної стану  $X(t)$  при різних значеннях  $P_0$ .



Залежність коефіцієнта  $A_3$  від  $P_0$ .

Модельовання динаміки траєкторій  $X(t)$  для  $A_2\{P_{\min}\} = 0.003$ .

Рис. 2.5. Вигляд залежностей модельних коефіцієнтів від  $P_0$

В табл. 2.2 наведено значення коефіцієнтів функцій залежності параметрів моделі  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_3$  від початкового рівня основного виходу  $P_0$ , що описуються формулами (2.43)–(2.45). Близькість значень  $b_0 \div b_{13}$  для різних  $A_2\{P_{\min}\}$  підтверджує структурну стійкість розробленої моделі.

Таблиця 2.2

Оцінені значення параметрів моделі

$A_2\{P_{\min}\}$	$b_0$	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_4$	$b_5$	$b_6$
0.001	0.05651	-3.94287	-0.34641	-6.90776	0.02524	1.89943	-0.01865
0.002	0.05651	-3.94183	-0.34645	-6.21461	0.01717	1.87414	-0.01935
0.003	0.05651	-3.94050	-0.34649	-5.80914	0.01245	1.84939	-0.01985
$A_2\{P_{\min}\}$	$b_7$	$b_8$	$b_9$	$b_{10}$	$b_{11}$	$b_{12}$	$b_{13}$
0.001	0.00014	1.98836	-0.02327	0.00020	6.90142	-0.17311	0.00133
0.002	0.00015	1.98074	-0.02489	0.00021	7.05647	-0.17969	0.00138
0.003	0.00016	1.96204	-0.02570	0.00023	7.11592	-0.18288	0.00141

При наявності експериментальних даних щодо впливу активних речовин на основну систему мікроорганізмів, розроблену модель можна використати для прогнозування динаміки двокomпонентної системи Моно-Ієрусалимського, яка описує взаємодію основної та побічної систем мікроорганізмів.

### 2.3. Методи ідентифікації термодерованих ХТС в умовах повної та часткової спостережуваності

Управління ХТС Моно-Ієрусалимського здійснюється за рахунок зміни температури її середовища. Температура впливає на параметри швидкості росту мікроорганізмів і споживання субстрату, тому в термодерованих моделях стаціонарні коефіцієнти  $A_1 \div A_7$  автономних моделей (1.9), (1.12)–(1.16) замінені спеціальними функціями  $H_i[\alpha, K]$ ,  $i = 1, 2, \dots, 7$ , що описують залежність швидкості хімічних реакцій від температури

$$H_i[\alpha, T(t)] = \exp(C_i - E_i T(t)^{-\alpha}), \quad (1.47)$$

де  $C_i$  – це максимальна енергія молекул середовища (субстрату, продуктів, систем мікроорганізмів),  $E_i$  – енергія активації,  $T(t)$  – температура середовища на момент  $t$  в градусах Кельвіна,  $\alpha \geq 0$  – константа.

Функція (1.47) була вперше запропонована в 1889 р. Сванте Арреніусом в рамках теорії активації молекул. Він показав, що в хімічних реакціях беруть участь не всі молекули (інакше вони б проходили миттєво), а лише ті, які у порівнянні із середньою енергією, якою володіють молекули середовища  $C_i$ , мають деяку надлишкову енергію – енергію активації  $E_i$ . Швидкість хімічної реакції залежить від кількості цих активних молекул, яка в свою чергу, визначається температурою. Тобто енергія активації – це та енергія, якою повинна володіти молекула для того, щоб прореагувати.

Функція Арреніуса (1.47) володіє наступними властивостями. При прямуванні температури до абсолютного нуля  $T(t) \rightarrow 0$  і оскільки  $\alpha \geq 0$ , дріб  $-E_i T(t)^{-\alpha} \rightarrow -\infty$ , тобто  $H_i[\alpha, T(t)] \rightarrow 0$ . Таким чином низькі значення температури призупиняють хід реакцій. При зростанні значення температури швидкість реакції також зростає. Зокрема при прямуванні температури до нескінченності  $T(t) \rightarrow \infty$  значення функції  $H_i[\alpha, T(t)] \rightarrow C_i$ , тобто до значення максимальної енергії молекул середовища. Функції Арреніуса набули широкого

використання в математичному моделюванні фізико-хімічних і біотехнологічних процесів [47, 62, 123].

При підстановці в сімейство автономних моделей (1.9), (1.12)–(1.16) замість стаціонарних коефіцієнтів  $A_1 \div A_7$  функцій Арреніуса  $H_i[\alpha, K]$ ,  $i = 1, 2, \dots, 7$  утворюється сімейство термодерованих моделей

$$\begin{cases} X'(t) = (H_1[1, T(t)]H_6[T(t), S(t), P(t)] - H_2[1, T(t)])X(t), \\ S'(t) = -H_3[1, T(t)] \frac{S(t)}{H_4[1, T(t)] + S(t)} X(t), \\ P'(t) = -H_7[1, T(t)]S'(t), \end{cases} \quad (2.48)$$

$$X(0) = X_0, \quad S(0) = S_0, \quad P(0) = 0. \quad (2.49)$$

Для представлення динамічного температурного профілю процесу  $T(t)$ ,  $t \in [0, t_{\max}]$  застосовано підхід, описаний в параграфі 1.3, що використовувався там при кодуванні температурного режиму у вигляді вектора дійсних чисел в задачі синтезу управління ХТП з мінімальними побічними продуктами, див. (1.21) та рис. 1.2.

Для моделювання технологічних процесів з використанням термодерованих моделей (2.48), (1.12)–(1.16) необхідно провести їх параметричну ідентифікацію, тобто оцінювання невідомих коефіцієнтів функцій Арреніуса (1.47),  $i = 1, 2, \dots, 7$ . За умов повної спостережуваності ХТС, тобто коли присутні експериментальні дані динаміки всіх трьох компонент її вектора стану:  $X(t)$ ,  $S(t)$  та  $P(t)$ , цю задачу можна розв'язати методами регресійного аналізу, що виконано в роботах Андре-Торо 1997–2004 рр. [51–53] для функції зворотнього зв'язку (1.16). Розглянемо цей підхід докладніше.

Перш за все необхідно нагромадити базу експериментальних вимірів динаміки концентрації всіх основних речовин в спеціально організованих лабораторних умовах. При цьому підготовані субстрат та система мікроорганізмів розділяються на  $m$  рівних частин. Кожну частину вносять в окремий періодичний реактор Моно-Ієрусалимського і проводять  $m$



термостатичних процесів ферментації. Причому в  $i$ -тому реакторі утримується  $i$ -тий ізотермічний режим  $T(t) = T_i = const$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$ . В ході процесів проводяться заходи з метою утримання сталих показників лужності середовища (рН), гідростатичного тиску та температури в усіх реакторах.

В кожному реакторі протоколюється динаміка концентрацій мікроорганізмів, активних вуглеводів субстрату та продуктів ферментації. Для чого час процесу  $t \in [0, t_{\max}]$  покривається сіткою з  $n$  вузлів  $t_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , і в кожному з них виконується вимірювання. Для проведення вимірювань перерахованих показників використовується обладнання та лабораторні методи, перелік яких подано в табл. 2.3.

Таблиця 2.3

Обладнання для вимірювання енергії активації, застосоване в дослідженнях Андре-Торо [51–53]

№	Показник	Прилади і методи
1.	Концентрація мікроорганізмів	Датчик оптичної густини. Зважування лабораторно-обробленої сухої маси.
2.	Концентрація активних вуглеводів субстрату і продуктів	Рідинний хроматограф з високою роздільною здатністю – HPLC (high-pressure liquid chromatograph). Метод Скоба.
3.	Лужність середовища	Датчик рН.
4.	Гідростатичний тиск	Датчик тиску.

Для підвищення точності вимірювань необхідно зменшити вплив невизначеності на процес ферментації. З цією метою ретельно стежать за тим, щоб якість сировини і фізіологічний стан мікроорганізмів якомога менше відрізнялися від експерименту до експерименту. Експерименти проводяться кілька разів. Після чого їхні результати усереднюються, щоб зменшити випадкові похибки вимірювань. Усереднені показники вимірювань концентрації мікроорганізмів  $X(t)$ , субстрату  $S(t)$  та продукту  $P(t)$  фіксуються у формі

$$X_{real}(t_i, T_j), S_{real}(t_i, T_j), P_{real}(t_i, T_j), \quad (1.50)$$

де  $t_i, i=1,2,\dots,n$  – дискретний вузол, в якому проводилося вимірювання,  $T_j, j=1,2,\dots,m$  – ізотермічні умови відповідного процесу.

З експериментальних вимірювань (1.50) формується база експериментальних вимірів у вигляді таблиці 2.4.

Таблиця 2.4

Вимірювання траєкторій змінних стану процесу для  $m$  ізотермічних процесів

Час $t$	$T(t) = T_1 = const$			$T(t) = T_2 = const$			...	$T(t) = T_m = const$		
	$X(t)$	$S(t)$	$P(t)$	$X(t)$	$S(t)$	$P(t)$		$X(t)$	$S(t)$	$P(t)$
$t_0 = 0$	$X(t_0, T_1)$	$S(t_0, T_1)$	$P(t_0, T_1)$	$X(t_0, T_2)$	$S(t_0, T_2)$	$P(t_0, T_2)$	...	$X(t_0, T_m)$	$S(t_0, T_m)$	$P(t_0, T_m)$
$t_1$	$X(t_1, T_1)$	$S(t_1, T_1)$	$P(t_1, T_1)$	$X(t_1, T_2)$	$S(t_1, T_2)$	$P(t_1, T_2)$	...	$X(t_1, T_m)$	$S(t_1, T_m)$	$P(t_1, T_m)$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$t_n = t_{max}$	$X(t_n, T_1)$	$S(t_n, T_1)$	$P(t_n, T_1)$	$X(t_n, T_2)$	$S(t_n, T_2)$	$P(t_n, T_2)$	...	$X(t_n, T_m)$	$S(t_n, T_m)$	$P(t_n, T_m)$

Ідентифікація невідомих коефіцієнтів функцій Арреніуса проводиться шляхом мінімізації наступної функції похибок

$$\begin{aligned}
 F_{NONLINFIT}(\vec{P}) = & \sum_{j=1}^m \sum_{i=0}^n [X_{sim}(\vec{P}, t_i, T_j) - X_{real}(t_i, T_j)]^2 + \\
 & + \sum_{j=1}^m \sum_{i=0}^n [S_{sim}(\vec{P}, t_i, T_j) - S_{real}(t_i, T_j)]^2 + \\
 & + \sum_{j=1}^m \sum_{i=0}^n [P_{sim}(\vec{P}, t_i, T_j) - P_{real}(t_i, T_j)]^2 \xrightarrow{\vec{P}} \min,
 \end{aligned} \quad (1.51)$$

де  $X_{real}(t_i, T_j)$ ,  $S_{real}(t_i, T_j)$  та  $P_{real}(t_i, T_j)$  – експериментальні вимірювання з табл. 2.4,  $X_{sim}(\vec{P}, t_i, T_j)$ ,  $S_{sim}(\vec{P}, t_i, T_j)$  та  $P_{sim}(\vec{P}, t_i, T_j)$  – модельні оцінки змінних стану процесу в  $i$ -тий дискрет часу  $t_i$ , що є розв'язками задачі Коші (2.48), (2.49) при встановленні сталого температурного режиму  $T(t) = T_j = const$  та підстановці коефіцієнтів функцій Арреніуса  $H_i[\alpha, K]$  (1.47),  $i=1,2,\dots,7$  в (2.48) відповідно до вектора

$$\vec{P} = (C_1 \quad E_1 \quad C_2 \quad E_2 \quad \dots \quad C_7 \quad E_7)^T. \quad (1.52)$$

Цю задачу можна розв'язати стандартними засобами довільного математичного пакету, наприклад, за допомогою стандартної функції нелінійної регресії `nlinfit` пакету прикладних програм MATLAB.

Постановка задачі ідентифікації при неспостережуваності динаміки концентрації мікроорганізмів  $X(t)$  записується аналогічно до задачі ідентифікації автономних моделей (2.2)–(2.4)

$$F_1(\vec{P}, \vec{T}) = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N [S_{sim}(\vec{P}, \vec{T}, t_i) - S_{real}(t_i)]^2 \rightarrow \min, \quad (2.53)$$

$$F_2(\vec{P}, \vec{T}) = [X_{sim}^*(\vec{P}, \vec{T}) - X_{real}^*]^2, \quad (2.54)$$

$$F_1(\vec{P}, \vec{T}) + \alpha F_2(\vec{P}, \vec{T}) \xrightarrow{\vec{P}} \min, \quad (2.55)$$

де  $S_{sim}(\vec{P}, \vec{T}, t_i)$ ,  $X_{sim}^*(\vec{P}, \vec{T})$  – модельні оцінки траєкторії концентрації субстрату та пікової концентрації мікроорганізмів, що є розв'язком задачі Коші (2.48), (2.49) під дією температурного профілю  $\vec{T}$  з встановленням коефіцієнтів функцій Арреніуса відповідно до вектора (1.52).

Завдяки своїй експоненційній формі функції Арреніуса (1.47) невід'ємні для будь-яких значень аргумента-температури середовища  $T(t)$  і коефіцієнтів  $C_i$ ,  $E_i$ , тому в процедурі розв'язку задачі ідентифікації (2.53) не потрібно використовувати спеціальні методи забезпечення невід'ємності модельних коефіцієнтів, що було необхідно при ідентифікації автономних моделей.

Початкове наближення значень коефіцієнтів функцій Арреніуса обчислюється на основі результатів параметричної ідентифікації автономних систем (1.9) та представлення коефіцієнтів загальної моделі у вигляді функцій Арреніуса (1.47) за формулою

$$C_i = \ln A_i - \frac{E_i}{T^*}, \quad i = \overline{1,7}, \quad (2.56)$$

де  $T^*$  – значення характерної температури реакції,  $A_i$  – значення  $i$ -того коефіцієнту автономної системи Моно.

Вимірювання коефіцієнтів енергії активації  $E_i$  передбачає складні лабораторні дослідження при різних сталих температурних режимах (див. параграф 1.2). Внаслідок складності необхідних досліджень в даній роботі використано значення енергії активації з літературних джерел [52, 62].

Існує проблема у виборі вдалого значення характерної температури реакції  $T^*$ . Природньо допустити, що це значення може дорівнювати простому середньому температури реакції протягом всього процесу

$$T^* = \frac{1}{t_{\max}} \int_0^{t_{\max}} T(t) dt. \quad (2.57)$$

Серед альтернативних методів визначення характерної температури можна запропонувати оцінки максимальної та мінімальної температур

$$T^* = \sup_{t \in [0, t_{\max}]} T(t), \quad (2.58)$$

$$T^* = \inf_{t \in [0, t_{\max}]} T(t). \quad (2.59)$$

Дослідження збіжності процедури ідентифікації при використанні початкових наближень згенерованих з використанням наведених оцінок значення характерної температури реакції знаходяться в параграфі 4.2.

Після ідентифікації коефіцієнтів термодерованої системи (2.48) з її допомогою можна прогнозувати динаміку технологічних процесів. Проте, як буде показано в наступному параграфі, спостереження промислових процесів свідчать про значну невизначеність їхньої динаміки. Базою врахування невизначеності виступає агрегат ідентифікованих точкових термодерованих моделей (2.48), на основі якого розроблено адаптивну нечітку модель динаміки періодичних ХТП. Побудова цього агрегату вимагає розв'язання великої кількості задач параметричної ідентифікації згаданих точкових моделей з використанням методів, що розглядалися в даному розділі.

Параграф 4.2 присвячено дослідженням характеристик і результатів параметричної ідентифікації автономних та термодерованих моделей Моно-Ієрусалимського на задачах ідентифікації модельних та виробничих траєкторій.

#### **2.4. Висновки другого розділу**

1. Розроблено метод усунення некоректності задач параметричної ідентифікації автономних моделей ХТС Моно-Ієрусалимського в умовах неповної спостережуваності. Даний метод базується на використанні спеціального виразу функції мети та дзеркального методу врахування природніх обмежень на значення модельних коефіцієнтів.

2. Розроблено метод початкового оцінювання параметрів сімейства автономних моделей з неспостережуваною змінною стану концентрації мікроорганізмів, що ґрунтується на врахуванні типових характеристик траєкторій змінних стану ХТС.

3. Розроблено метод уточнення параметрів автономних моделей на основі спеціальних схем розбиття основної задачі ідентифікації на послідовність підзадач.

4. З використанням вищезгаданих методів параметричної ідентифікації запропоновано метод структурної ідентифікації точкових моделей з керованим зворотнім зв'язком. Отримані з його використанням результати підтверджують структурну стійкість побудованих моделей.

5. Розглянуто підхід до параметричної ідентифікації сімейства термодерованих моделей в умовах повної спостережуваності. Зроблено висновки щодо його непридатності в задачах ідентифікації частково спостережуваних систем та в умовах невизначеності, яка має місце при значній неоднорідності технологічних компонентів.

6. Розроблено метод параметричної ідентифікації сімейства термодерованих моделей з неспостережуваною змінною стану концентрації мікроорганізмів на основі результатів ідентифікації їх автономних аналогів.

### РОЗДІЛ 3

## МЕТОДИ ІДЕНТИФІКАЦІЇ НЕЧІТКИХ МОДЕЛЕЙ

### ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ

#### 3.1. Нечітка модель ХТС

Основою для прогнозування динаміки процесу з врахуванням невизначеності служить термокерована модель (2.48), (2.49), множину параметрів  $\{\vec{P}_1, \vec{P}_2, \dots, \vec{P}_{N_{traj}}\}$  якої ідентифіковано по точкових траєкторіях  $S(t)$  ансамблю спостережених раніше реалізацій ХТП. Підставляючи в модель вектор параметрів  $\vec{P}_k \in \{\vec{P}_1, \vec{P}_2, \dots, \vec{P}_{N_{traj}}\}$  можна оцінити динаміку точкових траєкторій змінних стану  $k$ -тої реалізації ХТП для довільного температурного профілю. Таким чином для кожного температурного профілю можна побудувати пучки траєкторій змінних стану, що утворюються множиною параметрів  $\{\vec{P}_1, \vec{P}_2, \dots, \vec{P}_{N_{traj}}\}$ .

Пучок траєкторій змінної стану концентрації субстрату  $S(t)$  знаходиться в межах інтервалу  $[S^-(\vec{T}, t), S^+(\vec{T}, t)]$

$$S^+(\vec{T}, t) = \max_{k=1, 2, \dots, N_{traj}} S_{sim}(\vec{P}_k, \vec{T}, t), \quad (3.1)$$

$$S^-(\vec{T}, t) = \min_{k=1, 2, \dots, N_{traj}} S_{sim}(\vec{P}_k, \vec{T}, t), \quad (3.2)$$

де  $N_{traj}$  – загальна кількість спостережених реалізацій ХТП;  $S_{sim}(\vec{P}_k, \vec{T}, t)$  – точкова оцінка концентрації субстрату в час  $t$ , що є розв'язком задачі Коші (2.48), (2.49) при встановленні температурного профілю  $\vec{T}$  і параметрів  $\vec{P}_k$ , які ідентифіковані по  $k$ -тій спостереженій реалізації.

В межі інтервалу  $[S^-(\vec{T}, t), S^+(\vec{T}, t)]$  потрапляють траєкторії субстрату всіх раніше спостережених реалізацій, тому надалі цей інтервал називатимемо інтервалом із спостережним рівнем невизначеності. При прогнозуванні динаміки нового процесу робиться припущення, що траєкторія його змінної

стану  $S(t)$  належатиме даному інтервалу.

Прогнозне значення  $S(t)$  може описуватися інтервальною, нечіткою або випадковою величиною з фінітним законом розподілу в межах інтервалу  $S(t) \in [S^-(\vec{T}, t), S^+(\vec{T}, t)]$ . Перехід від інтервальної і нечіткої форм опису до імовірнісної відбувається після нагромадження необхідної для побудови функцій густини розподілу кількості емпіричних даних, аналогічно до того як це запропоновано в [72]. Використання нечітких функцій обумовлено обмеженістю обсягів статистичної інформації щодо перебігів однотипних технологічних процесів внаслідок їх постійних удосконалень та значної тривалості. Цих обсягів достатньо лише для моделювання траєкторій із спостереженням інтервалом невизначеності, без врахування їхньої адаптації.

Для обрання форми функції належності нечіткого числа, що описує прогнозне значення  $S(t)$  проаналізуємо вибірку 30 реалізацій ХТП при однакових значеннях контрольованих параметрів. Як видно з рис. 1.1 (б) траєкторії вибірки характеризуються помітним згущенням у центрі. Коли розбити початкові інтервали  $[S^-(\vec{T}, t), S^+(\vec{T}, t)]$  для кожного дискрету часу  $t \in \{t_0, t_1, t_2, \dots, t_N\}$  на 7 рівних підінтервалів і обчислити відносні частоти потрапляння виробничих траєкторій у межі кожного з них, то отримаємо часовий профіль гістограм, зображений на рис. 3.1.

Гістограми рис. 3.1 мають виражені піки, тобто в кожному випадку частота попадань в той чи інший підінтервал домінує над рештою. Така поведінка процесу може бути описана трикутною фінітною функцією належності. Як альтернативний закон розподілу обрано рівномірний закон. Відхилення або прийняття гіпотези про останній дозволить виявити чи є підстави розглядати імовірнісну або нечітку природу явища чи достатньо обмежитися інтервальним описом прогнозних значень.

При побудові трикутної функції належності допущено, що з деякою малою ненульовою вірогідністю концентрація субстрату нової реалізації процесу може потрапляти на краї інтервалу  $[S^-(\vec{T}, t), S^+(\vec{T}, t)]$ . Цю малу вірогідність покладено

оберненопропорційною до кількості спостережених реалізацій процесу  $N_{traj}$ . Трикутна функція належності з точками  $[S_{агрег.}^-(\vec{T}, t), S_{агрег.}^{середнє}(\vec{T}, t), S_{агрег.}^+(\vec{T}, t)]$  будується із найвищим значенням в середній точці  $\mu[S_{агрег.}^{середнє}(\vec{T}, t)] = 1$ , нульовими значеннями на межах агрегованого інтервалу функції належності  $\mu[S_{агрег.}^-(\vec{T}, t)] = \mu[S_{агрег.}^+(\vec{T}, t)] = 0$  та мінімальними ненульовими значеннями на межах прогнозного інтервалу  $\mu[S^-(\vec{T}, t)] = \mu[S^+(\vec{T}, t)] = 1/N_{traj}$ , що показано на рис. 3.2 (аргументи температурного профілю  $\vec{T}$  і незалежної змінної  $t$  в функціях  $S^-(\vec{T}, t)$ ,  $S^+(\vec{T}, t)$ ,  $S_{агрег.}^-(\vec{T}, t)$  та  $S_{агрег.}^+(\vec{T}, t)$  опущено).

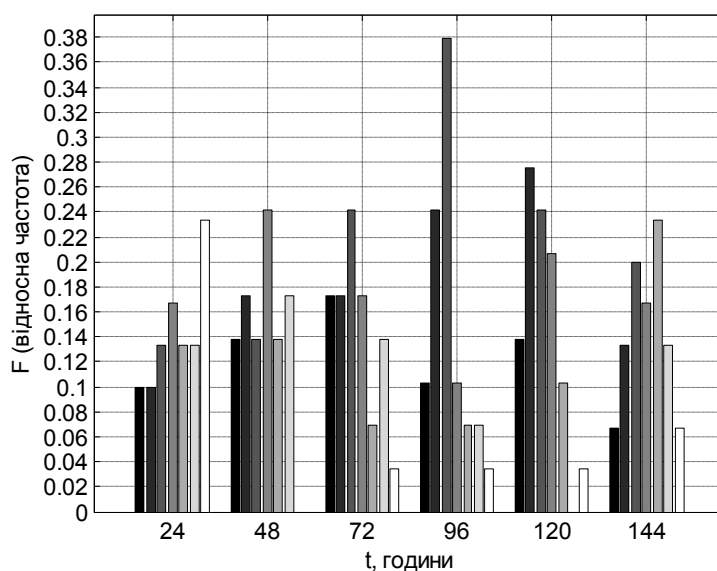


Рис. 3.1. Часовий профіль гістограм відносних частот вимірювань концентрації субстрату для 30 реалізацій ХТП при однакових значеннях контрольованих параметрів

Для перевірки гіпотез про природу закону розподілу використано статистичний критерій Колмогорова-Смірнова. Перевірялася пара нуль-гіпотез:  $H_0^1$  = “Закон розподілу випадкової величини  $S(t)$  – рівномірний”,  $H_0^2$  = “Закон розподілу випадкової величини  $S(t)$  має трикутну форму”. Альтернативні гіпотези  $H_1^1, H_1^2$  – про те, що відповідні закони розподілу не можуть описати природу явища.



Перевірка гіпотез виконувалась наступним чином. Для кожного дискрету часу процесу  $t \in \{t_0, t_1, t_2, \dots, t_N\}$  генерувалися вибірки псевдовипадкових чисел з рівномірним та трикутним законом розподілу в інтервалі  $[S_{\text{агрег.}}^-(\vec{T}, t), S_{\text{агрег.}}^+(\vec{T}, t)]$ . Після цього проводився тест Колмогорова-Смірнова на сумісність законів розподілу згенерованої вибірки та вибірки спостережених траєкторій на 5 % рівні значущості.

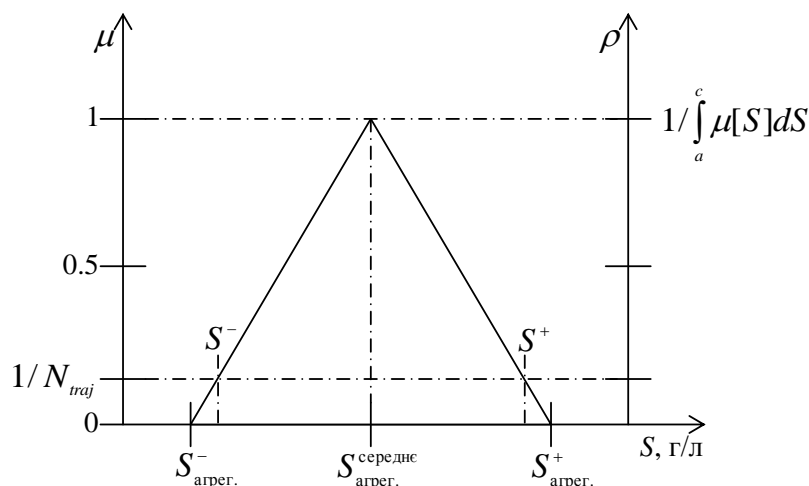


Рис. 3.2. Трикутна функція належності (розподілу)

Генерування рівномірно-розподіленої випадкової послідовності в інтервалі  $[S_{\text{агрег.}}^-(\vec{T}, t), S_{\text{агрег.}}^+(\vec{T}, t)]$  виконувалось за допомогою стандартних засобів. Для генерування трикутно-розподіленої випадкової послідовності використано підхід, що ґрунтується на побудові трикутної функції належності і наступного її перетворення у функцію щільності розподілу за формулою

$$\rho[S(t)] = \frac{\mu[S(t)]}{\int_{S_{\text{агрег.}}^-(\vec{T}, t)}^{S_{\text{агрег.}}^+(\vec{T}, t)} \mu[S(t)] d[S(t)]},$$

як показано на рис. 3.2. Аналітично функція належності має вигляд

$$\mu(x) = \begin{cases} 0, & \text{при } x < S_{\text{агрег.}}^-(\vec{T}, t) \text{ та } x > S_{\text{агрег.}}^+(\vec{T}, t), \\ \alpha_0 + \alpha_1 x, & \text{при } S_{\text{агрег.}}^-(\vec{T}, t) \leq x < S_{\text{агрег.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t), \\ \alpha_2 + \alpha_3 x, & \text{при } S_{\text{агрег.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t) \leq x \leq S_{\text{агрег.}}^+(\vec{T}, t), \end{cases} \quad (3.3)$$

$$\text{де } \alpha_0 = 1 - \frac{(1 - N_{traj})b}{N_{traj}[S^-(\vec{T}, t) - b]}, \quad \alpha_1 = \frac{1 - N_{traj}}{N_{traj}[S^-(\vec{T}, t) - b]}, \quad \alpha_2 = 1 - \frac{(1 - N_{traj})b}{N_{traj}[S^+(\vec{T}, t) - b]},$$

$$\alpha_3 = \frac{1 - N_{traj}}{N_{traj}[S^+(\vec{T}, t) - b]}, \quad b = S_{\text{агрег.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t). \text{ Межі інтервалу } [S_{\text{агрег.}}^-(\vec{T}, t), S_{\text{агрег.}}^+(\vec{T}, t)]$$

обчислюються за формулами

$$\left. \begin{aligned} S_{\text{агрег.}}^-(\vec{T}, t) &= q[S^-(\vec{T}, t), S_{\text{агрег.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t), N_{traj}] \\ S_{\text{агрег.}}^+(\vec{T}, t) &= q[S^+(\vec{T}, t), S_{\text{агрег.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t), N_{traj}] \end{aligned} \right\} \quad (3.4)$$

за допомогою функції

$$q(x, b, N_{traj}) = b - N_{traj}(x - b)/(1 - N_{traj}). \quad (3.5)$$

Для встановлення значення найвірогіднішої точки  $b$  випробувано два підходи. В першому підході вона покладається рівною простому середньому пучка траєкторій в даний момент часу

$$S_{\text{агрег.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t) = \bar{S}(\vec{T}, t) = \frac{1}{N_{traj}} \sum_{k=1}^{N_{traj}} S_{sim}(\vec{P}_k, \vec{T}, t). \quad (3.6)$$

В другому підході значення найвірогіднішої точки  $b$  знаходиться наступним чином. Інтервали  $[S^-(\vec{T}, t), S^+(\vec{T}, t)]$  в кожен момент часу розбиваються на три рівні підінтервали. Обчислюються відносні частоти попадання виробничих траєкторій в кожен з них. В підінтервалах з максимальними значеннями частот обчислюються прості середні по вимірюваннях, що потрапили в їхні межі. Таким чином найвірогідніша точка дорівнює локальному середньому в підінтервалі з найвищою частотою

$$S_{\text{агрег.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t) = \bar{S}_{\text{умоч}}(\vec{T}, t) = \frac{1}{n[\Pi(t)]} \sum_{k \in \Pi(t)} S_{sim}(\vec{P}_k, \vec{T}, t), \quad (3.7)$$

де  $\Pi(t)$  – множина індексів точкових траєкторій концентрації субстрату, що

потрапили в підінтервал з найвищою частотою,  $n[\Pi(t)]$  – потужність даної множини.

В результаті перевірки гіпотез про форму функцій щільності розподілу випадкової величини  $S(t)$  виявилось, що в період  $t \in [0,72]$  годин, немає підстав до відхилення пари нуль-гіпотез  $H_0^1$  та  $H_0^2$ , тобто величина  $S(t)$  може описуватися як рівномірним так і трикутним законом розподілу для обох підходів до встановлення найвірогіднішої точки  $S_{\text{агрег.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t)$ .

Для часу  $t > 72$  години, результати перевірки гіпотез показують, що нуль-гіпотезу  $H_0^1$  слід відхилити і прийняти альтернативну  $H_1^1$ , тобто закон розподілу  $S(t)$  на цій ділянці часу не рівномірний. Крім того виявилось, що при використанні першого підходу до обчислення найвірогіднішої точки  $S_{\text{агрег.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t)$  за середнім всіх точкових траєкторій (3.6), слід також відхилити і нуль-гіпотезу  $H_0^2$  про трикутний закон розподілу  $S(t)$ . Тоді як при використанні другого підходу до обчислення  $S_{\text{агрег.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t)$  за локальним середнім в підінтервалі з найвищою частотою (3.7), нуль-гіпотеза  $H_0^2$  підтверджується. Цей випадок ілюструється рис. 3.3 гістограмами відносних частот та функцією щільності розподілу для першого (а) та другого (б) підходів в момент часу  $t = 96$ . Звідси випливає, що другий підхід (з використанням формули (3.7)) дозволяє побудувати функцію розподілу з формою, що краще відповідає природі процесу. Тому для подальших досліджень слід рекомендувати саме його.

Таким чином отримаємо часовий ряд трикутних нечітких чисел концентрації субстрату  $S(t)$  протягом часу процесу, що схематично зображено на рис. 3.4. Показник  $S_0$  означає інтенсивність субстрату в початковий момент часу  $S(0) = S_0$ . В момент часу 48 годин нижня межа трикутної функції належності дорівнює  $S_4$ , найвірогідніше значення дорівнює  $S_2$ , а верхня межа –  $S_1$ . В час 96 годин верхня межа трикутного числа опускається нижче за найвірогідніше попередньої функції належності до  $S_3$ , найвірогідніше значення дорівнює

нижній межі попередньої функції належності  $S_4$ , а нижня межа цієї функції дорівнює нульовому значенню інтенсивності  $S(96) = 0$ . В час 144 годин верхня межа трикутного числа  $S_5$  практично збігається з нижньою межею  $S_4$  для функції належності в час 48 годин, найвірогідніше значення дорівнює  $S_6$ , а нижня – нульовому значенню.

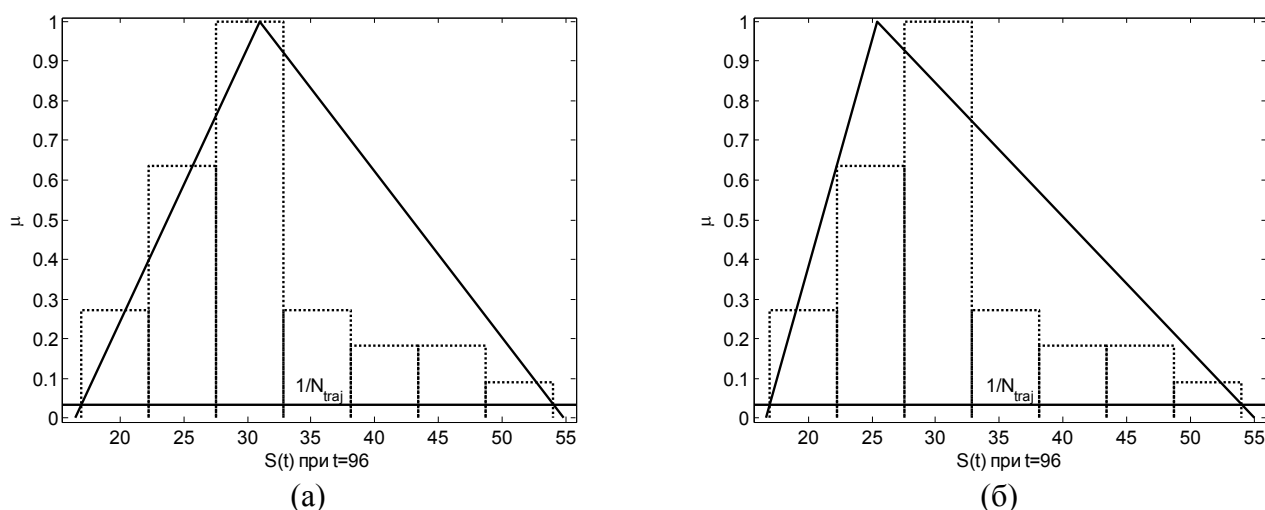


Рис. 3.3. Порівняння двох підходів до побудови функції належності: (а) за формулою простого середнього (3.6), (б) за формулою локального середнього (3.7)

Часовий ряд нечітких чисел будемо називати нечіткою траєкторією процесу. В додатку А наведено трикутні числа нечіткої траєкторії концентрації субстрату з спосреженим рівнем невизначеності, що обчислені з використанням формули локального середнього (3.7). Введемо наступне позначення нечіткої траєкторії концентрації субстрату  $S(t)$

$$\tilde{S}(\vec{T}, t) = [S^-(\vec{T}, t); \bar{S}_{\text{умоч}}(\vec{T}, t); S^+(\vec{T}, t)], \quad t \in [0, t_{\max}], \quad (3.8)$$

де найвірогідніші значення  $S_{\text{агрег.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t)$  часового ряду трикутних чисел та їхні межі  $[S_{\text{агрег.}}^-(\vec{T}, t), S_{\text{агрег.}}^+(\vec{T}, t)]$  визначаються за формулами (3.4), (3.7) (див. рис. 3.2, 3.4). Можна зробити припущення, що траєкторія концентрації субстрату нового технологічного процесу буде проходити в околі точок найвірогіднішої

траєкторії  $S_{\text{агрег.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t)$  і не буде виходити за межі  $[S_{\text{агрег.}}^-(\vec{T}, t), S_{\text{агрег.}}^+(\vec{T}, t)]$ . При достатньо великій кількості спостережених реалізацій  $N_{\text{трај}}$  це допущення справджується.

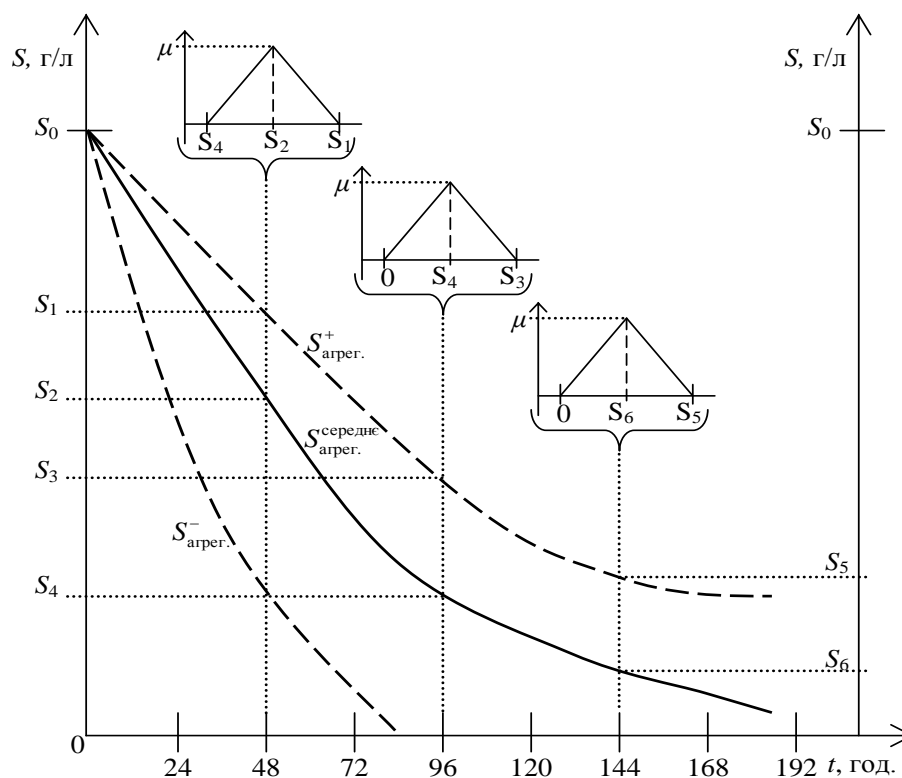


Рис. 3.4. Приклад нечіткої траєкторії субстрату  $S(t)$  в періодичному реакторі

Нечітка траєкторія концентрації основного продукту  $\tilde{P}(\vec{T}, t)$  обчислюється за формулами

$$\bar{P}(\vec{T}, t) = \frac{1}{n[\Pi(t)]} \sum_{k \in \Pi(t)} P_{\text{sim}}(\vec{P}_k, \vec{T}, t), \quad (3.9)$$

$$P^+(\vec{T}, t) = \max_{k=1, 2, \dots, N_{\text{трај}}} P_{\text{sim}}(\vec{P}_k, \vec{T}, t),$$

$$P^-(\vec{T}, t) = \min_{k=1, 2, \dots, N_{\text{трај}}} P_{\text{sim}}(\vec{P}_k, \vec{T}, t),$$

$$\tilde{P}(\vec{T}, t) = [P^-(\vec{T}, t); \bar{P}(\vec{T}, t); P^+(\vec{T}, t)], \quad t \in [0, t_{\text{max}}], \quad (3.10)$$

де  $P_{\text{sim}}(\vec{P}_k, \vec{T}, t)$  – точкова оцінка концентрації основного продукту в час  $t$ , що є розв'язком задачі Коші (2.48), (2.49) при встановленні температурного профілю

$\vec{T}$  і параметрів  $\vec{P}_k$ , які ідентифіковано по  $k$ -тій спостереженій реалізації.

Нечіткі траєкторії побічних продуктів  $\tilde{P}_{BM}(\vec{T}, t)$ ,  $\tilde{P}_{BN}(\vec{T}, t)$  отримуються аналогічно. Слід зауважити, що локальні середні основного (3.9) та побічних продуктів обчислюються на основі тієї ж множини індексів траєкторій концентрації субстрату в інтервалі найвищої частоти  $\Pi(t)$  та її потужності  $n[\Pi(t)]$ , що й при обчисленні найвірогідніших оцінок концентрації субстрату в (3.7).

Розроблена в даному параграфі модель ХТС може вважатися дедуктивно-індуктивною, оскільки базується не лише на апіорі відомій структурі множини точкових моделей, але й на раніше спостережених реалізаціях процесів. В §4.3 наведено чисельні експерименти моделювання контрольної вибірки реалізацій ХТП з її використанням та проаналізовано ефекти від доповнення її методами адаптації, що запропоновані в наступному параграфі.

### **3.2. Адаптивна нечітка модель ХТС на основі агрегату точкових термодерованих моделей**

Запропонована в попередньому параграфі модель дозволяє будувати нечіткі траєкторії змінних стану ХТС  $\tilde{S}(\vec{T}, t)$ ,  $\tilde{P}(\vec{T}, t)$ ,  $\tilde{P}_{BM}(\vec{T}, t)$  та  $\tilde{P}_{BN}(\vec{T}, t)$  під дією довільних температурних управлінь  $\vec{T}$ . Однак, отримані таким чином, прогнозні оцінки із спостережним рівнем невизначеності занадто розмиті (неточні), що утруднює задачу синтезу управління ХТП з мінімальними побічними продуктами на їх основі. Цих труднощів можна уникнути з використанням методу адаптації нечіткої моделі.

Розроблений метод адаптації базується на наступному основному допущенні: існує певний період стабілізації процесу  $t \in [0, t_{stable}]$ , протягом якого процес ще не цілком встановився і володіє більшою мірою невизначеності (хаотична область, див. § 1.1) у порівнянні з ділянкою  $t > t_{stable}$ , де сукупність траєкторій процесу починає розмежовуватися на групи пучків, що коливаються в околі певних інтервалів. Останні називатимемо інтервалами неусувної

невизначеності. Їхня ширина зужується поблизу найвірогідніших траєкторій і розширюється при віддаленні від них, що проілюстровано рис. 3.5 для  $t_{stable} = 72$  години, де повна множина траєкторій рис. 1.1 розділена на 4 пучки.

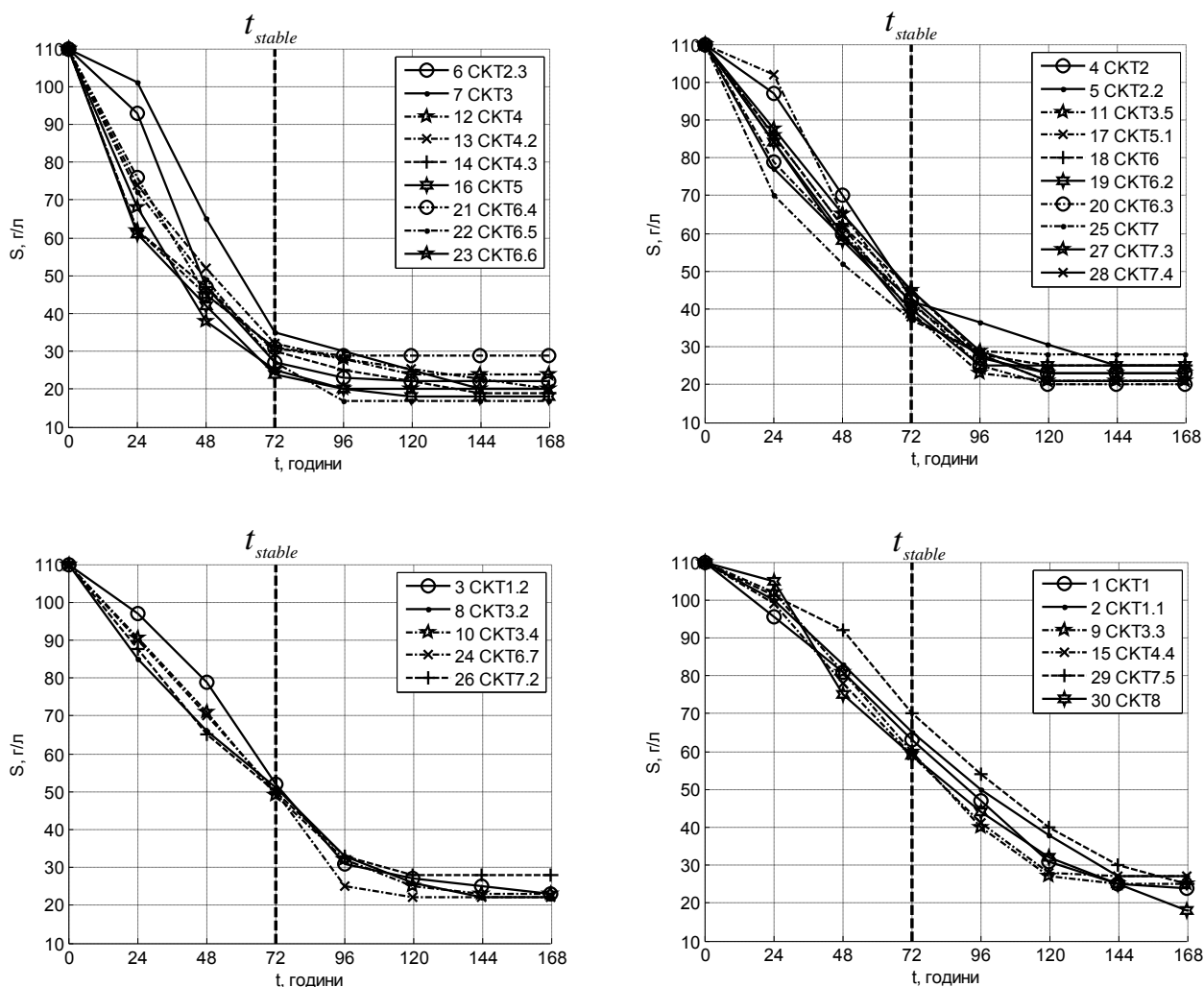


Рис. 3.5. Розмежування траєкторій на групи пучків в час  $t > t_{stable}$

Завдання адаптації полягає в уточненні нечітких траєкторій моделі в такий спосіб, щоб інтервал їхньої невизначеності був якомога ближчим до неусувного. Проведений в попередньому параграфі статистичний аналіз показує, що динаміка спостереженої множини траєкторій може бути описана функцією розподілу з трикутною густиною. З цього випливає, що густини функцій розподілу в інтервалах неусувної невизначеності також повинні бути трикутними. Тому для моделювання нечітких адаптивних траєкторій використано трикутні функції належності.

Процес адаптації траєкторій розпочинається після завершення періоду

стабілізації при  $t > t_{stable}$  на основі так званого прогнозного агрегату, що моделює неусувну невизначеність процесу. Потужність агрегату обмежена знизу мінімальною кількістю траєкторій  $M(N_{traj})$ , де  $N_{traj}$  – потужність їх спостереженої множини. Така структура агрегату моделює залежність ширини інтервалу неусувної невизначеності від вірогідності поточної траєкторії.

Агрегат формується так щоб, його найвірогідніше значення  $S_{адапт.}^{середнє}(\vec{T}, t)$  найменше відхилялося від поточної траєкторії, а його межі  $[S_{адапт.}^{-}(\vec{T}, t), S_{адапт.}^{+}(\vec{T}, t)]$  якомога щільніше охоплювали інтервал неусувної невизначеності (див. рис. 3.6).

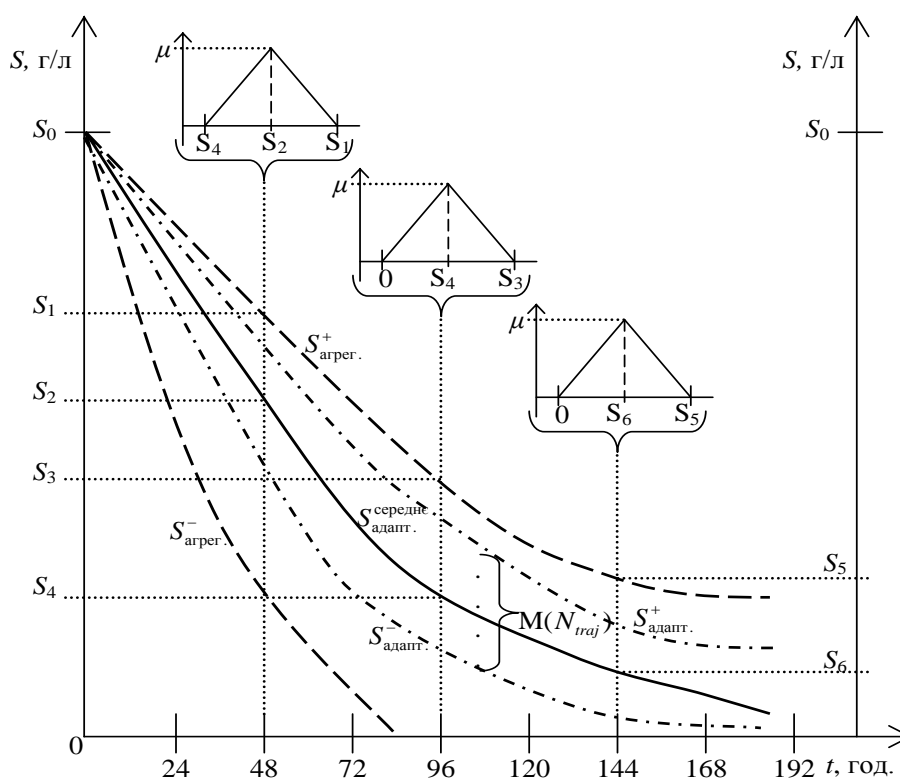


Рис. 3.6. Неусувний рівень невизначеності процесу

Якщо між поточним значенням та найвірогіднішим не проходить жодної траєкторії агрегату, то залишаємо в ньому не менше  $M(N_{traj})$  траєкторій. При цьому повинне зберігатися центральне розташування найвірогіднішої траєкторії відносно поточної. На рис. 3.7 порівняно прогнози моделей без та з адаптацією, де зірочками позначено поточну траєкторію, пунктирними кривими



зображено найвірогіднішу траєкторію  $S_{\text{агрег.}}^{\text{середнє}}$  (тонкий пунктир) та інтервали прогнозування  $[S_{\text{агрег.}}^-, S_{\text{агрег.}}^+]$  (товстий пунктир) моделі без адаптації (з спостереженим рівнем невизначеності), а відповідними суцільними кривими найвірогіднішу траєкторію  $S_{\text{адапт.}}^{\text{середнє}}$  та інтервал прогнозування  $[S_{\text{адапт.}}^-, S_{\text{адапт.}}^+]$  адаптивної моделі (побудовану з використанням прогнозного агрегату).

Якщо поточне значення більше (менше) від найвірогіднішого, так, що між ними проходить одна або кілька траєкторій агрегату, то вилучаємо з останнього необхідну кількість найвіддаленіших траєкторій. При цьому між новою найвірогіднішою

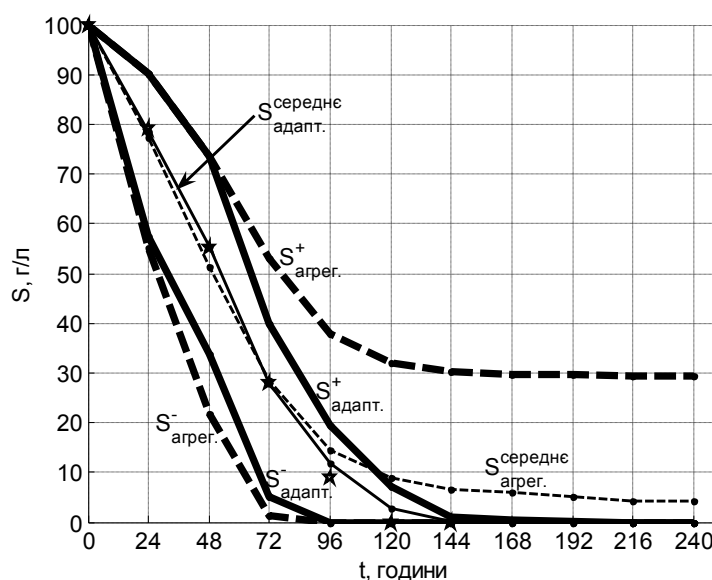


Рис. 3.7. Прогнозування типової реалізації процесу

та поточною траєкторіями не повинні проходити траєкторії агрегату, що проілюстровано на рис. 3.8, де в (а) показано прогнозування реалізації в момент часу  $t = 24$  до уточнення, в (б) – після уточнення. Отримане експериментальне спостереження позначене жирною точкою та вертикальною пунктирною лінією; траєкторії, що належать до агрегату (беруть участь в прогнозуванні) наведені кружечками, а ті, що з нього виключені (не беруть участі в прогнозуванні) – дрібними квадратиками. Видно, що після уточнення було відкинуто 11 траєкторій з правого боку, що забезпечило практичне співпадіння найвірогіднішого значання агрегату з поточним спостереженням. Утворена в результаті адаптації нечітка траєкторія наведена на рис. 3.8 (в), де видно, що інтервал неусувної невизначеності зміщується вниз відносно інтервалу з спостереженим рівнем невизначеності. Існують також випадки аналогічного зміщення вгору, що проілюстровано рис. 3.8 (г).

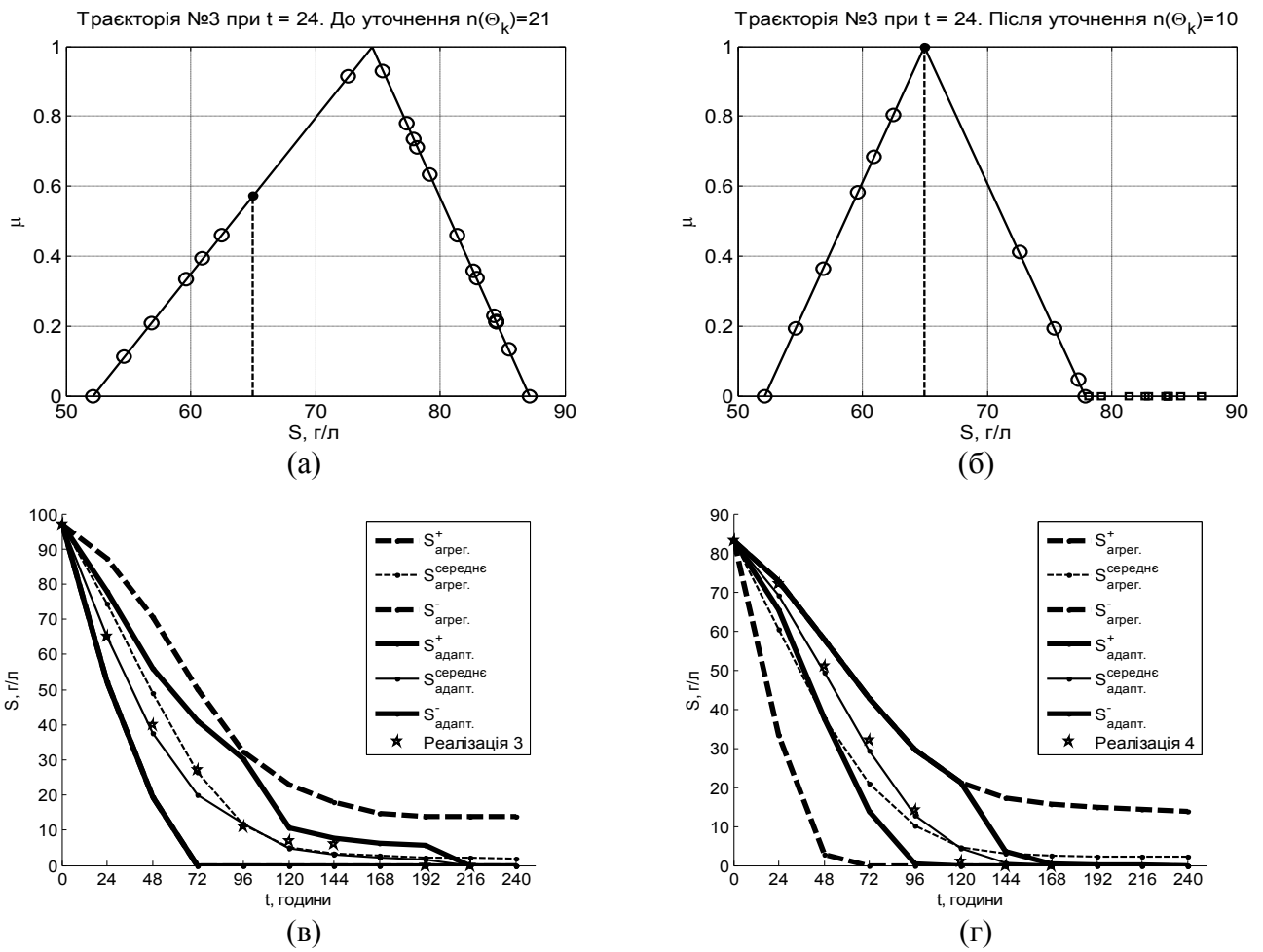


Рис. 3.8. Адаптація при відхиленні поточного спостереження від середнього по агрегату: у вигляді функцій належності – (а) до уточнення, (б) після уточнення; у вигляді нечітких траєкторій – відхилення: (в) вниз, (г) вгору

Коли поточні значення виходять за межі множини спостережених, то будується додатковий агрегат на період цього виходу. Найвірогідніша траєкторія агрегату формується на основі граничної траєкторії спостереженої множини. Межа агрегату для траєкторій, що виходять за спостережену множину утворюється шляхом симетричного проектування спостереженої межі агрегату відносно найвірогіднішої траєкторії. При поверненні траєкторії в спостережену множину відновлюється агрегат, сформований на останньому дискреті, що передував виходу. Цей випадок проілюстровано на рис. 3.9, де процес спочатку вийшов за межі спостереженої множини, а потім повернувся в неї. Відзначимо, що мінімальна потужність може зменшуватись лише у випадку, якщо прогнозовані кінцеві значення деяких траєкторій агрегату більші

ніж поточне значення, оскільки такий прогноз суперечив би монотонності спадання величини  $S(t)$ .

Мінімальна потужність агрегату може зменшуватись лише у випадку, якщо прогнозовані кінцеві значення деяких точкових траєкторій агрегату більші ніж поточне значення, оскільки такий прогноз суперечив би монотонності спадання

величини  $S(t)$ , тобто фізичній природі явища. Процес відкидання нереалізованих траєкторій в час  $t = 120$  ілюструється рис. 3.10 (а, б), де в (а) показано прогнозування до відкидання, а в (б) – прогнозування після відкидання. Кружечками наведені точкові траєкторії агрегату, на основі яких відбувається прогноз, а дрібними квадратами наведено траєкторії, що були усунені внаслідок їх нереалізованості. Аналогічні ілюстрації наведено для часу  $t = 144$  на рис. 3.10 (в, г), де після уточнення в агрегаті залишається лише 5 точкових траєкторій.

Формалізуємо описані вище принципи адаптивного прогнозування у вигляді алгоритму адаптації. Нехай спостереження динаміки концентрації субстрату  $S_{real}(t_k)$  у виробничому процесі відбуваються в часових дискретах  $t_k$ ,  $k = \overline{0, N}$ . Введемо множину індексів точкових траєкторій  $\Theta_k$ , що формують прогнозний агрегат в  $k$ -тий дискрет часу. Назвемо цю множину навчальною вибіркою. До початку нового процесу (при  $k = 0$ ) навчальна вибірка містить індекси всіх спостережених траєкторій  $\Theta_0 = \{1, 2, \dots, N_{traj}\}$ , де  $N_{traj}$  – потужність множини спостережених траєкторій.

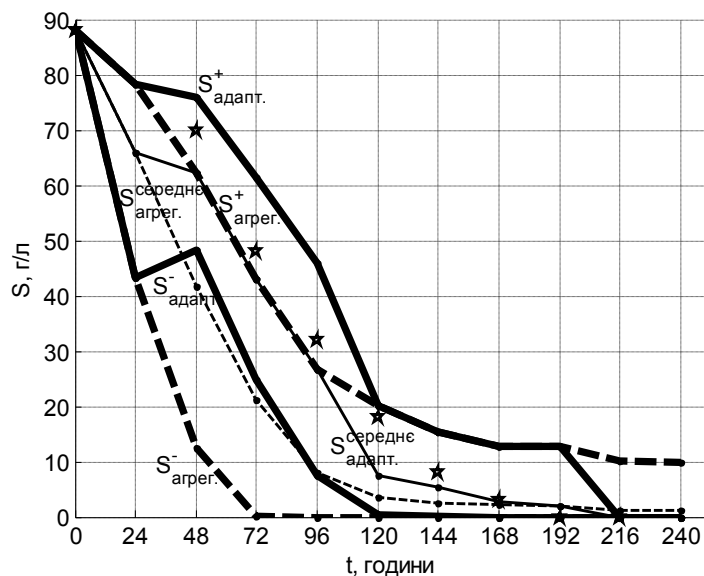


Рис. 3.9. Прогнозування атипичної реалізації процесу

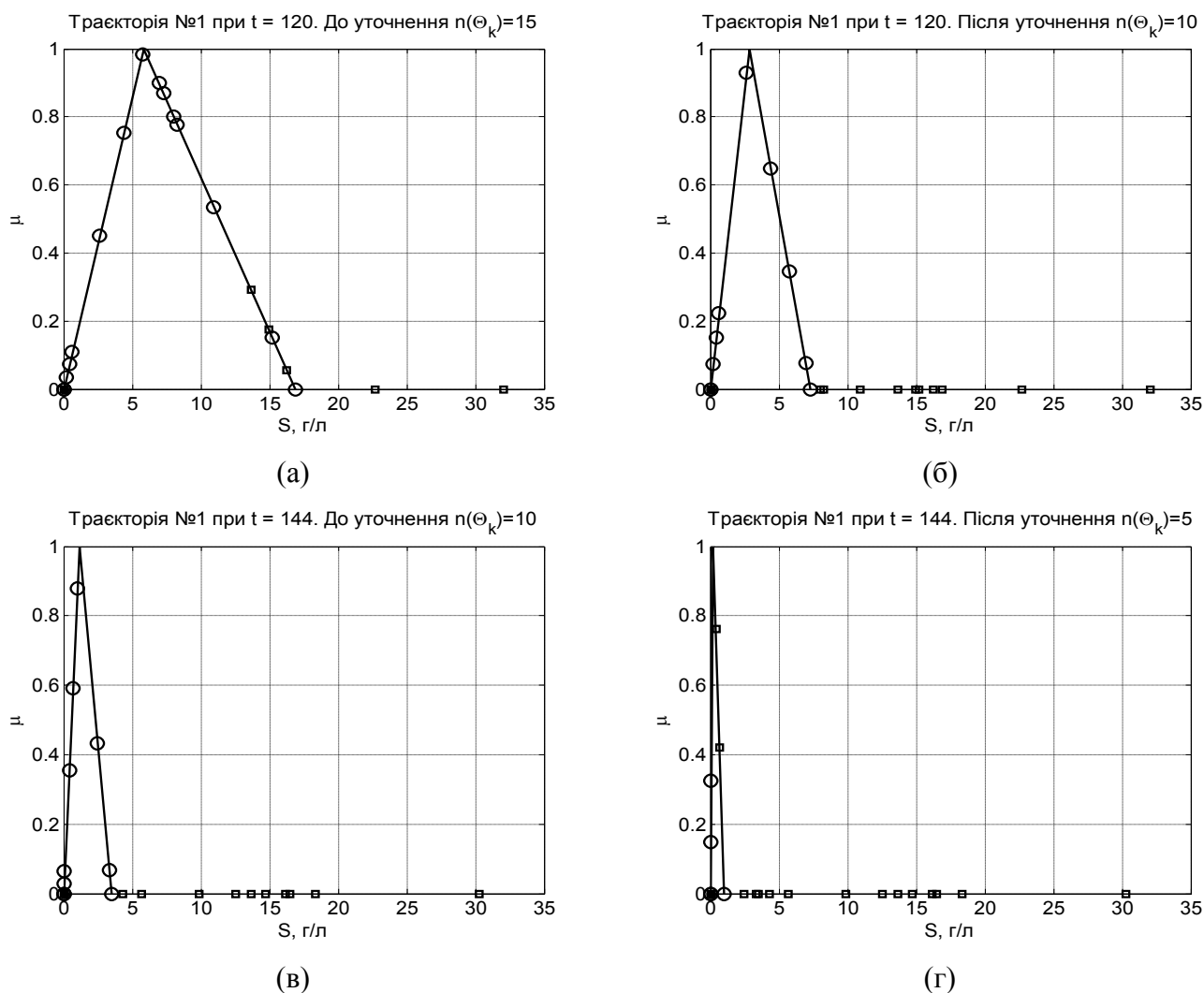


Рис. 3.10. Функції належності, що ілюструють принцип відкидання нереалізованих траекторій

В кожен наступний дискрет часу  $t_k$  формується нова навчальна вибірка (новий прогнозний агрегат) на основі попередньої шляхом порівняння точкових траекторій з експериментальними спостереженнями концентрації субстрату поточного процесу  $S_{real}(t_k)$ . Операція формування нової навчальної вибірки здійснює уточнення структури прогнозного агрегату і її можна формально записати у вигляді

$$\Theta_k \leftarrow R[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)], \quad (3.11)$$

де  $\Theta_k, \Theta_{k-1}$  – навчальні вибірки точкових траєкторій в поточний і попередній дискрети,  $R[\bullet]$  – операція формування нової навчальної вибірки на базі попередньої та спостереження траєкторії поточного процесу  $S_{real}(t_k)$ .

Нехай  $n(\Theta_k)$  – потужність навчальної вибірки  $\Theta_k$ . В кінці своєї роботи операція (3.11) утворює нову множину індексів  $\Theta_k$ , потужність якої менша або дорівнює потужності множини в попередній дискрет часу, однак не менша за мінімально-допустиму потужність  $M(N_{traj})$  за умови відсутності в ній нереалізованих траєкторій

$$M(N_{traj}) \leq n(\Theta_k) \leq n(\Theta_{k-1}). \quad (3.12)$$

Перепишемо формули (3.1), (3.2), (3.7) відповідно до введеного поняття прогнозного агрегату. Найвірогідніша траєкторія буде обчислюватися за формулою локального середнього в межах навчальної вибірки  $\Theta_k$

$$S_{адапт.}^{середнє}(\vec{T}, t) = \bar{S}(\Theta_k, \vec{T}, t_k) = \frac{1}{n[\Pi_k(t_k)]} \sum_{i \in \Pi_k(t_k)} S_{sim}(\vec{P}_i, \vec{T}, t_k), \quad (3.13)$$

де  $\Pi_k(t_k)$  – підмножина індексів виробничих траєкторій навчальної вибірки  $\Theta_k$ , що належать підінтервалу з найвищою частотою в час  $t_k$  ( $\Pi_k(t_k) \subseteq \Theta_k$ );  $n[\Pi_k(t_k)]$  – потужність підмножини  $\Pi_k(t_k)$ .

Екстремальні нижні і верхні траєкторії обчислюються тепер також в межах навчальної вибірки  $\Theta_k$

$$S^-(\Theta_k, \vec{T}, t_k) = \min_{i \in \Theta_k} S_{sim}(\vec{P}_i, \vec{T}, t_k), \quad (3.14)$$

$$S^+(\Theta_k, \vec{T}, t_k) = \max_{i \in \Theta_k} S_{sim}(\vec{P}_i, \vec{T}, t_k). \quad (3.15)$$

При адаптивному прогнозуванні допускається попадання на межі екстремалей (3.14), (3.15) з деякою невеликою вірогідністю, аналогічно до того, як при прогнозуванні з спостереженням рівнем невизначеноті (див. рис. 3.2)

$$\left. \begin{aligned} S_{\text{адапт.}}^{-}(\vec{T}, t) &= q[S^{-}(\Theta_k, \vec{T}, t), S_{\text{адапт.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t), N_{\text{raj}}] \\ S_{\text{адапт.}}^{+}(\vec{T}, t) &= q[S^{+}(\Theta_k, \vec{T}, t), S_{\text{адапт.}}^{\text{середнє}}(\vec{T}, t), N_{\text{raj}}] \end{aligned} \right\},$$

де  $q[\dots]$  – функція (3.5).

Таким чином отримуємо нечітку траєкторію концентрації субстрату для даної навчальної вибірки точкових траєкторій в  $k$ -тий дискрет часу

$$\tilde{S}(\Theta_k, \vec{T}, t_k) = [S^{-}(\Theta_k, \vec{T}, t_k); \bar{S}(\Theta_k, \vec{T}, t_k); S^{+}(\Theta_k, \vec{T}, t_k)]. \quad (3.16)$$

Аналогічно відбувається побудова нечітких траєкторій змінних стану інтенсивностей основного і побічних продуктів  $\tilde{P}(\Theta_k, \vec{T}, t_k)$ ,  $\tilde{P}_{BM}(\Theta_k, \vec{T}, t_k)$ ,  $\tilde{P}_{BN}(\Theta_k, \vec{T}, t_k)$ .

Розглянемо алгоритм уточнення агрегату точкових моделей, що виконує адаптацію нечіткої траєкторії (3.16) при надходженні чергового експериментального спостереження  $S_{\text{real}}(t_k)$  виробничого процесу в  $k$ -тий дискрет часу.

### Алгоритм УАТМ (уточнення агрегату точкових моделей)

УАТМ.1. Початок ХТП, присвоюємо початковий дискрет часу  $k = 1$ .

УАТМ.2. Отримуємо експериментальне спостереження концентрації субстрату нового процесу в  $k$ -тий дискрет часу  $S_{\text{real}}(t_k) = S(t)$  при  $t = t_k$ .

УАТМ.3. Відкидаємо траєкторії, що не можуть реалізуватися згідно фізичної природи явища  $\Theta_{k-1} \leftarrow R_F[\Theta_{k-1}, S_{\text{real}}(t_k)]$  та перевіряємо чи не відбувся вихід поточного спостереження за межі прогнозного агрегату, формуючи в цьому випадку додатковий прогнозний агрегат  $\Theta_{k-1} \leftarrow \text{TestOutsid e}[\Theta_{k-1}, S_{\text{real}}(t_k)]$ .

УАТМ.4. **Якщо**  $S_{\text{real}}(t_k) < S_{\text{sim}}(\vec{P}_j, \vec{T}, t_k) < \bar{S}(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k) \mid \exists j \in \Theta_{k-1}$ , тобто спостереження поточного процесу  $S_{\text{real}}(t_k)$  менше від найвірогіднішого значення  $\bar{S}(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k)$  і в навчальній вибірці  $\Theta_{k-1}$  існує проміжна траєкторія, що проходить між поточним та найвірогіднішим

значеннями, то сформувати нову навчальну вибірку траєкторій  $\Theta_k \leftarrow R_R[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)]$ .

УАТМ.5. **Інакше, якщо**  $\bar{S}(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k) < S_{sim}(\vec{P}_j, \vec{T}, t_k) < S_{real}(t_k) | \exists j \in \Theta_{k-1}$ , тобто спостереження поточного процесу  $S_{real}(t_k)$  більше від найвірогіднішого значення  $\bar{S}(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k)$  і в навчальній вибірці  $\Theta_{k-1}$  існує проміжна траєкторія, що проходить між найвірогіднішим та поточним значеннями, то сформувати нову навчальну вибірку траєкторій  $\Theta_k \leftarrow R_L[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)]$ .

УАТМ.6. **Інакше, в навчальній вибірці**  $\Theta_{k-1}$  немає проміжної траєкторії, котра б проходила між найвірогіднішим значенням агрегату та поточним спостереженням, отже поточне спостереження знаходиться в околі найвірогіднішої траєкторії. Формуємо нову навчальну вибірку траєкторій  $\Theta_k \leftarrow R_C[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)]$ .

УАТМ.7. Наступний дискрет часу  $k \leftarrow k + 1$ .

УАТМ.8. **Якщо**  $k \leq N$ , то перехід на УАТМ.2.

УАТМ.9. **Кінець.**

В наведеному алгоритмі використано п'ять процедур реорганізації навчальної вибірки прогнозного агрегату  $\Theta_{k-1} \leftarrow R_F[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)]$ ,  $\Theta_{k-1} \leftarrow \text{TestOutsid e}[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)]$ ,  $\Theta_k \leftarrow R_R[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)]$ ,  $\Theta_k \leftarrow R_L[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)]$  та  $\Theta_k \leftarrow R_C[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)]$ . Зважаючи на об'ємність останніх, вони не були включені безпосередньо в текст алгоритму. Далі наведено їхній формальний опис та роль в функціонуванні алгоритму УАТМ від початку до завершення технологічного процесу.

До початку процесу (при  $k = 0$ ), нечіткі траєкторії формуються за найвірогіднішими, верхніми та нижніми оцінками в межах всієї сукупності траєкторій агрегату  $\Theta_0$ . На початку процесу збір експериментальних даних проводиться починаючи з першого часового дискрета  $k = 1$ . Після отримання

вимірювання концентрації субстрату поточного процесу  $S_{real}(t_1)$ , це значення співставляється з кінцевими значеннями точкових траєкторій агрегату і відкидаються ті з них, що не можуть реалізуватися згідно монотонно-спадної динаміки  $S(t)$ , див. УАТМ.3. Значення  $S_{real}(t_1)$  також співставляється із значенням найвірогіднішої траєкторії  $\bar{S}(\Theta_0, \vec{T}, t_1)$  в той самий момент часу  $t = t_1$  і алгоритм уточнює структуру прогнозного агрегату і вигляд нечітких траєкторій шляхом корегування складу вибірки  $\Theta_0$ , формуючи нову вибірку  $\Theta_1$ . В ході наступних спостережень за процесом корегування вибірки траєкторій повторюється і для спостереження в  $k$ -тому часовому вузлі виконується процедура формування нової вибірки точкових траєкторій (див. (3.11)).

Розглянемо формальний опис алгоритму  $\Theta_{k-1} \leftarrow R_F[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)]$ , що виконується на кроці УАТМ.3 для відкидання тих траєкторій агрегату, що дають фізично-неадекватні прогнози.

**Алгоритм  $\Theta_{k-1} \leftarrow R_F[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)]$**

**R<sub>F</sub>.1.** Введемо порожню множину  $\lambda \leftarrow \emptyset$ .

Нехай  $\Theta_{k-1} \equiv \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n\}$ , де  $\theta_j$  –  $j$ -тий елемент множини  $\Theta_{k-1}$ .

**R<sub>F</sub>.2.** Цикл для  $j = 1, 2, \dots, n$

**R<sub>F</sub>.2.1.** Фіксуємо  $j$ -тий індекс  $s \leftarrow \theta_j$ .

**R<sub>F</sub>.2.2.** Якщо  $S_{sim}(\bar{P}_s, \vec{T}, t_{max}) \leq S_{real}(t_k)$ , тобто прогнозне кінцеве значення  $s$ -тої траєкторії агрегату не перевищує значення поточного спостереження, то додаємо в множину  $\lambda$  її індекс  $\lambda \leftarrow s$ .

**R<sub>F</sub>.3.** Кін.цикл.

**R<sub>F</sub>.4.** Переносимо склад тимчасової множини в результуючу  $\Theta_{k-1} \leftarrow \lambda$ .

**R<sub>F</sub>.5.** Кінець.

При виконанні кроків УАТМ.4 та УАТМ.5 формується нова вибірка  $\Theta_k$  точкових траєкторій, які задіяні при побудові нечітких траєкторій. Формування



цієї вибірки організується алгоритмами  $R_R[\bullet]$  та  $R_L[\bullet]$  згідно з правилом

$$[\bar{S}(\Theta_k, \vec{T}, t_k) - S_{real}(t_k)]^2 \rightarrow \min, \quad (3.17)$$

яке означає, що значення найвірогіднішої траєкторії агрегату в час  $t_k$  повинне найменше відрізнятись від поточного спостереження  $S_{real}(t_k)$  при використанні навчальної вибірки  $\Theta_k$ .

Розглянемо докладніше алгоритми  $R_R[\bullet]$  та  $R_L[\bullet]$ . Алгоритм  $R_R[\bullet]$  (крок УАТМ.4) формує нову вибірку точкових траєкторій  $\Theta_k$  для якої найвірогідніша траєкторія  $\bar{S}(\Theta_k, \vec{T}, t_k)$  мінімально відрізняється від значення поточного спостереження  $S_{real}(t_k)$ . Формування вибірки  $\Theta_k$  виконується шляхом відкидання з попередньої вибірки  $\Theta_{k-1}$  тих межових траєкторій, які після впорядкування знаходяться вгорі, щоб опустити найвірогіднішу траєкторію агрегату вниз до значення спостереження  $S_{real}(t_k)$ . Впорядкування траєкторій агрегату проводиться по зростанню значень їхніх точкових оцінок концентрації субстрату в час  $t_k$

$$S_{sim}(\vec{P}_{j-1}, \vec{T}, t_k) \leq S_{sim}(\vec{P}_j, \vec{T}, t_k) \quad \forall j \in \Theta_{k-1} \mid j > 1, \quad (3.18)$$

що позначимо операцією

$$\theta \leftarrow \text{sort}[\Theta_{k-1}, t_k], \quad (3.19)$$

де  $\Theta_{k-1}$  – невпорядкована навчальна вибірка,  $t_k$  – часовий вузол,  $\theta$  – впорядкована навчальна вибірка. Наведемо формальний опис алгоритму  $R_R[\bullet]$ .

**Алгоритм  $\Theta_k \leftarrow R_R[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)]$**

$R_R.1.$  Сортування  $\theta \leftarrow \text{sort}[\Theta_{k-1}, t_k]$  (згідно з (3.18)).

$R_R.2.$  Обчислення початкового відхилення між значенням найвірогіднішої траєкторії та поточним спостереженням  $\Delta \leftarrow [S_{real}(t_k) - \bar{S}(\theta, \vec{T}, t_k)]^2$ .

- R<sub>R</sub>.3. Виконання початкового присвоєння  $\Theta_k \leftarrow \Theta_{k-1}$ .
- R<sub>R</sub>.4. **Якщо**  $n(\Theta_k) \leq M(N_{traj})$ , то **вихід** з алгоритму.
- R<sub>R</sub>.5. Нехай  $\theta \equiv \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n\}$ . Тоді відкидаємо індекс однієї крайньої верхньої траєкторії  $\theta \leftarrow \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}\}$ .
- R<sub>R</sub>.6.  $\delta \leftarrow [S_{real}(t_k) - \bar{S}(\theta, \vec{T}, t_k)]^2$ .
- R<sub>R</sub>.7. **Якщо**  $\delta < \Delta$ , то
- R<sub>R</sub>.7.1. Встановимо нове відхилення  $\Delta \leftarrow \delta$ .
- R<sub>R</sub>.7.2. Отримуємо нову множину  $\Theta_k \leftarrow \theta$ .
- R<sub>R</sub>.7.3. Перехід на крок R<sub>R</sub>.4.

R<sub>R</sub>.8. **Кінець.**

Операція  $\theta \leftarrow \text{sort}[\Theta_{k-1}, t_k]$  (крок R<sub>R</sub>.1.) виконує сортування індексів траєкторій навчальної вибірки  $\Theta_{k-1}$  по значеннях концентрації в час  $t_k$  в порядку зростання, згідно з (3.18). Після цього, операція  $\Delta \leftarrow [S_{real}(t_k) - \bar{S}(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k)]^2$  (крок R<sub>R</sub>.2.) обчислює відхилення значення поточного спостереження від найвірогіднішої траєкторії агрегату (в межах навчальної вибірки  $\Theta_{k-1}$ ) в час  $t_k$ . Змінна  $\Delta$  в алгоритмі виражає найкраще, тобто найменше досягнуте відхилення, яке в процесі вилучення межових траєкторій має монотонно зменшуватися. На початку своєї роботи (R<sub>R</sub>.2.) алгоритм встановлює для  $\Delta$  початкове значення при використанні старої навчальної вибірки  $\Theta_{k-1}$  (R<sub>R</sub>.3.). На кроці R<sub>R</sub>.4. перевіряється чи в множині  $\Theta_k$  є достатня кількість траєкторій для продовження виконання алгоритму, тобто чи перевищує ця кількість мінімальну потужність агрегату  $M(N_{traj})$ . На кроці R<sub>R</sub>.5. операція  $\theta \leftarrow \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}\}$  відкидає індекс крайньої верхньої траєкторії  $\theta_n$ , залишаючи всі нижні. На наступному кроці R<sub>R</sub>.6. операція  $\delta \leftarrow [S_{real}(t_k) - \bar{S}(\theta, \vec{T}, t_k)]^2$  проводить обчислення відхилення між значеннями спостереження поточного процесу і найвірогіднішої траєкторії на уточненій (з вилученою крайньою верхньою траєкторією) вибірці  $\theta$  в час  $t_k$ .

На кроці R<sub>R</sub>.7. перевіряється чи вилучення крайньої траєкторії дало покращення (зменшення) величини відхилення. Якщо так, то запам'ятовуємо

покращене значення відхилення і новий склад навчальної вибірки в множині  $\Theta_k$ . В іншому випадку – вилучення траєкторії виграшу не дало і остання зміна навчальної вибірки анулюється, після чого алгоритм припиняє свою роботу. Таким чином алгоритм може зупинитися в двох випадках: коли вилучення межових траєкторій виграшу більше не дає або коли навчальна вибірка  $\Theta_k$  досягає мінімально-допустимої потужності  $n(\Theta_k) = M(N_{traj})$ .

Алгоритм  $R_L[\bullet]$  (крок УАТМ.5) формує нову навчальну вибірку  $\Theta_k$  шляхом відкидання з попередньої  $\Theta_{k-1}$  крайніх нижніх траєкторій, щоб підняти найвірогіднішу траєкторію  $\bar{S}(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k)$  вгору до значення поточного спостереження  $S_{real}(t_k)$ . Формальний опис алгоритму  $R_L[\bullet]$  аналогічний до опису алгоритму  $R_R[\bullet]$  за виключенням самої операції усунення межових траєкторій  $R_{R.5}$ , яка заміщується на операцію  $\theta \leftarrow \{\theta_2, \theta_3, \dots, \theta_n\}$ , в якій вилучається індекс крайньої нижньої траєкторії  $\theta_1$ .

Алгоритм  $R_C[\bullet]$  виконується у випадку, якщо попередні дві умови відхилення поточного спостереження від найвірогіднішої траєкторії агрегату не спрацювали. Цей алгоритм формує нову вибірку точкових траєкторій  $\Theta_k$  на основі попередньої  $\Theta_{k-1}$  шляхом відкидання одночасно і верхніх і нижніх межових траєкторій. При цьому контролюється, щоб нова найвірогідніша траєкторія агрегату зберігала своє центральне розташування відносно поточного спостереження і навчальна вибірка задовольняла умові на мінімально-допустиму потужність (3.12). Нижче наведено формальний опис даного алгоритму.

**Алгоритм**  $\Theta_k \leftarrow R_C[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)]$

**R<sub>C.1.</sub>** Якщо період стабілізації процесу ще триває  $t_k < t_{stable}$ , то вихід з алгоритму без змін навчальної вибірки прогнозного агрегату.

**R<sub>C.2.</sub>**  $\theta \leftarrow \text{sort}[\Theta_{k-1}, t_k]$ .

**R<sub>C.3.</sub>**  $\Delta \leftarrow [S_{real}(t_k) - \bar{S}(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k)]^2$ .

- R<sub>C</sub>.4. Початкове присвоєння  $\Theta_k \leftarrow \Theta_{k-1}$ .
- R<sub>C</sub>.5. **Якщо**  $n(\Theta_k) \leq M(N_{traj})$ , то **вихід** з алгоритму.
- R<sub>C</sub>.6. Нехай  $\theta \equiv \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n\}$ .
- R<sub>C</sub>.7. **Якщо**  $S_{real}(t_k) > \bar{S}(\theta, \vec{T}, t_k)$ , то відкидаємо індекс однієї крайньої нижньої траєкторії  $\theta \leftarrow \{\theta_2, \theta_3, \dots, \theta_n\}$ .
- R<sub>C</sub>.8. **Інакше** відкидаємо індекс однієї крайньої верхньої траєкторії  $\theta \leftarrow \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}\}$ .
- R<sub>C</sub>.9. Обчислимо відхилення  $\delta \leftarrow [S_{real}(t_k) - \bar{S}(\theta, \vec{T}, t_k)]^2$ .
- R<sub>C</sub>.10. **Якщо**  $\delta < \Delta$ , то
- R<sub>C</sub>.10.1. Встановимо нове відхилення  $\Delta \leftarrow \delta$ .
- R<sub>C</sub>.10.2. Одержуємо нову множину  $\Theta_k \leftarrow \theta$ .
- R<sub>C</sub>.10.3. Перехід на крок R<sub>C</sub>.5.
- R<sub>C</sub>.11. **Кінець**.

На першому кроці алгоритму R<sub>C</sub>.1 проводиться перевірка чи завершилась початкова стадія процесу, протягом якої нагромаджується його передісторія. Це зроблено з метою запобігання поспішного відкидання точкових траєкторій при попаданні експериментального виміру в окіл найвірогіднішої траєкторії, оскільки на цей час процес ще не цілком встановлений і це попадання може статися випадково. Решта кроків алгоритму мають свої аналоги в попередньо розглянутих алгоритмах R<sub>F</sub>[•], R<sub>L</sub>[•] та R<sub>R</sub>[•].

Для подолання другої слабкої сторони, тобто при виході експериментального спостереження за межі, окреслені нечіткою траєкторією моделювання проводиться з використанням додаткового прогнозного агрегату, що складається з  $M(N_{traj})$  його точкових траєкторій, які знаходяться найближче до відповідної межі (верхньої або нижньої). Найвірогідніша траєкторія процесу встановлюється рівною тій межовій траєкторії за межі якої відбувся вихід. Протилежна (верхня, нижня) межа траєкторія проектується симетрично до утвореної з

$M(N_{traj})$  точкових траєкторій першої (нижньої, верхньої) межової траєкторії.

З практики відомо, що вихід за межі агрегату, як правило, спричинений недотриманням технологічних умов проведення ХТП. Тому таку поведінку процесу слід розглядати як атипову. Однак його динаміка все ж прогнозується шляхом формування додаткового прогнозного агрегату на період виходу в алгоритмі  $\Theta_{k-1} \leftarrow \text{TestOutsid e}[\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k)]$ . Цей алгоритм використовує дві «глобальні» змінні: прапорець виходу спостережень за межі прогнозного коридору *bool\_outside* та тимчасову змінну  $\Theta'$ , в котрій зберігається навчальна вибірка прогнозного агрегату, що передував виходу. В додатку Б наведено формальний опис даного алгоритму. При його викладі використовувалися описані раніше позначення.

Апробація розробленої адаптивної нечіткої моделі вимагає проведення серії модельних експериментів на контрольній вибірці траєкторій, що не використовувалися при побудові моделі, тобто тих траєкторій, які не присутні в складі початкової навчальної вибірки  $\Theta_0$ . Результати апробації запропонованих методів на задачах моделювання технологічних процесів броварного бродіння наведено в § 4.3.

В наступному параграфі описано методи синтезу управління ХТП з мінімальними інтенсивностями побічних продуктів, що описуються нечіткими оцінками  $\tilde{P}_{BM}(\Theta_k, \vec{T}, t_k)$ ,  $\tilde{P}_{BN}(\Theta_k, \vec{T}, t_k)$ , сформованими з використанням розробленої в даному параграфі адаптивної нечіткої моделі.

### **3.3. Управління хіміко-технологічним процесом з мінімальними побічними продуктами в умовах невизначеності**

Задача синтезу управління технологічними процесами з мінімальними кінцевими інтенсивностями побічних продуктів при забезпеченні входження інтенсивності основного продукту в межі заданого допустимого інтервалу становить значну практичну цінність. Її розв'язання дозволить покращити якість кінцевих виробів багатьох періодичних технологічних процесів, зокрема,

харчової промисловості. У випадку спеціально організованих лабораторних досліджень, де можна скористатися припущенням про детермінованість параметрів процесу ця задача записується у вигляді мінімізації критеріїв концентрації побічних продуктів (1.19) з обмеженням на входження концентрації основного продукту в заданий інтервал (1.20). Її розв'язано в роботах [51, 53, 62, 125], що розглядалося в § 1.3.

Для розв'язання згаданої задачі в умовах невизначеності можна використати запропоновану в двох попередніх параграфах адаптивну нечітку модель. Вона дозволяє прогнозувати динаміку інтенсивностей основного та побічних продуктів у вигляді нечітких оцінок під дією довільного температурного режиму  $\vec{T}$ , а також уточнює побудовані прогнози за даними експериментальних спостережень. Для формалізації задачі моделювання процесу з мінімальними побічними продуктами можна використати два підходи: метод Белмана-Заде, що полягає у комбінуванні обмежень та критеріїв [2, 7, 54] або методи дефазифікації [39, 114], тобто приведення нечітких оцінок в точкові.

В першому підході, на основі методу Белмана-Заде, виконується розрахунок перетину нечітких оцінок концентрації основного та побічних продуктів з нечіткими термами, що характеризують їх бажані рівні

$$\tilde{D}_1(\vec{T}) = \tilde{P}_{BN}(\vec{T}, t_{\max}) \cap \tilde{G}_1, \quad (3.20)$$

$$\tilde{D}_2(\vec{T}) = \tilde{P}_{BM}(\vec{T}, t_{\max}) \cap \tilde{G}_2, \quad (3.21)$$

$$\tilde{D}_3(\vec{T}) = \tilde{P}(\vec{T}, t_{\max}) \cap \tilde{G}_3, \quad (3.22)$$

де  $\tilde{P}_{BN}(\vec{T}, t_{\max})$ ,  $\tilde{P}_{BM}(\vec{T}, t_{\max})$ ,  $\tilde{P}(\vec{T}, t_{\max})$  – нечіткі множини оцінок концентрації немонотонного, монотонного побічних та основного продуктів (для скорочення аргумент навчальної вибірки прогнозного агрегату  $\Theta_k$  опущено),  $\tilde{G}_1$  – нечіткий терм “мінімальна концентрація немонотонного побічного продукту”,  $\tilde{G}_2$  – нечіткий терм “мінімальна концентрація монотонного побічного продукту”,  $\tilde{G}_3$  – нечіткий терм “бажана концентрація основного продукту”.

Операція перетину нечітких множин відповідає операції мінімуму для їхніх функцій належності. Функції належності  $\mu_{D_1}[\vec{T}, p]$ ,  $\mu_{D_2}[\vec{T}, p]$ ,  $\mu_{D_3}[\vec{T}, p]$  нечітких перетинів  $\tilde{D}_1(\vec{T})$ ,  $\tilde{D}_2(\vec{T})$ ,  $\tilde{D}_3(\vec{T})$  обчислюються за формулами

$$\mu_{D_1}[\vec{T}, p] = \min \{ \mu_{BN}[\vec{T}, p]; \mu_{G_1}[p] \}, \quad (3.23)$$

$$\mu_{D_2}[\vec{T}, p] = \min \{ \mu_{BM}[\vec{T}, p]; \mu_{G_2}[p] \}, \quad (3.24)$$

$$\mu_{D_3}[\vec{T}, p] = \min \{ \mu_p[\vec{T}, p]; \mu_{G_3}[p] \}, \quad (3.25)$$

де  $p$  – точкове значення концентрації відповідного продукту,  $\mu_{BN}[\vec{T}, p]$ ,  $\mu_{BM}[\vec{T}, p]$  – функції належності нечітких оцінок концентрації немонотонного та монотонного побічних продуктів,  $\mu_p[\vec{T}, p]$  – функція належності нечіткої оцінки концентрації основного продукту,  $\mu_{G_1}[p]$ ,  $\mu_{G_2}[p]$ ,  $\mu_{G_3}[p]$  – функції належності нечітких термів  $\tilde{G}_1$ ,  $\tilde{G}_2$ ,  $\tilde{G}_3$ .

Нечіткі терми  $\tilde{G}_1$ ,  $\tilde{G}_2$ , що характеризують відповідність значень концентрації побічних продуктів до мінімального рівня і мають функції належності, форму яких схематично зображено на рис. 3.11, в літературі такі функції одержали назву Z-функцій належності [2, 39]. Нечіткий терм  $\tilde{G}_3$  характеризує відповідність концентрації основного продукту до бажаного рівня і може задаватися функцією належності довільної форми, наприклад, трикутної, трапецевидної або дзвіноподібної.

Чим повніше перетинаються множини термів  $\tilde{G}_1$ ,  $\tilde{G}_2$ ,  $\tilde{G}_3$  з нечіткими оцінками концентрації основного та побічних продуктів, тим кращим є відповідний розв'язок задачі по відношенню до даного терму. Це положення схематично проілюстровано на рис. 3.12 для (3.20), де показано перетин нечіткої оцінки кінцевої концентрації немонотонного побічного продукту  $\tilde{P}_{BN}(\vec{T}, t_{\max})$  з нечітким термом  $\tilde{G}_1$ . Згідно класичного методу Белмана-Заде оптимальним розв'язком задачі вважається той, який забезпечує максимізацію функції належності перетину всіх її критеріїв і обмежень. Проте в нашому випадку таке виз-

начення оптимального розв'язку позбавлене змісту, оскільки перетин множин  $\tilde{D}_1(\vec{T}) \cap \tilde{D}_2(\vec{T}) \cap \tilde{D}_3(\vec{T})$  дасть порожню множину внаслідок відмінності в порядках значень концентрації відповідних продуктів. Натомість для оцінювання якості того чи іншого розв'язку задачі можна застосувати функціонал суми максимумів функцій належності  $\mu_{D_1}[\vec{T}, p]$ ,  $\mu_{D_2}[\vec{T}, p]$ ,  $\mu_{D_3}[\vec{T}, p]$  нечітких перетинів  $\tilde{D}_1(\vec{T})$ ,  $\tilde{D}_2(\vec{T})$ ,  $\tilde{D}_3(\vec{T})$

$$Q(\vec{T}) = \sup_p \mu_{D_1}[\vec{T}, p] + \sup_p \mu_{D_2}[\vec{T}, p] + \sup_p \mu_{D_3}[\vec{T}, p] \rightarrow \max. \quad (3.26)$$

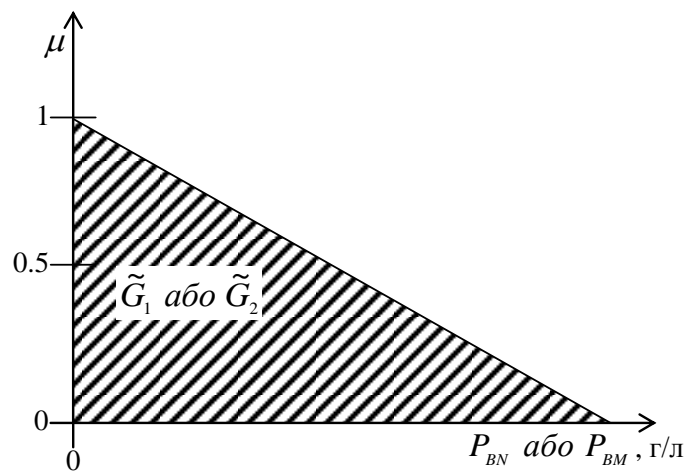


Рис. 3.11. Схематичне зображення форми функцій належності нечітких термів  $\tilde{G}_1$ ,  $\tilde{G}_2$

Крім того доцільно ввести ваги на роль кожного критерію. Відповідно до класичного методу Белмана-Заде [7, 39, 54] зважування проводиться через піднесення до степеня нечіткого терму кожного критерію при обчисленні функцій належності нечітких множин-перетинів  $\mu_{D_1}[\bullet]$ ,  $\mu_{D_2}[\bullet]$ ,  $\mu_{D_3}[\bullet]$

$$\mu_{D_1}[\alpha_1, \vec{T}, p] = \min \{ \mu_{BN}[\vec{T}, p]; \mu_{G_1}[p]^{\alpha_1} \}, \quad (3.27)$$

$$\mu_{D_2}[\alpha_2, \vec{T}, p] = \min \{ \mu_{BM}[\vec{T}, p]; \mu_{G_2}[p]^{\alpha_2} \}, \quad (3.28)$$

$$\mu_{D_3}[\alpha_3, \vec{T}, p] = \min \{ \mu_p[\vec{T}, p]; \mu_{G_3}[p]^{\alpha_3} \}, \quad (3.29)$$

де  $\mu_{D_1}[\alpha_1, \vec{T}, p]$ ,  $\mu_{D_2}[\alpha_2, \vec{T}, p]$ ,  $\mu_{D_3}[\alpha_3, \vec{T}, p]$  – зважені функції належності



множин перетину нечітких оцінок концентрації основного та побічних продуктів з нечіткими термами, що характеризують їх бажані рівні,  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \in [0;1]$  – ваги відповідних критеріїв.

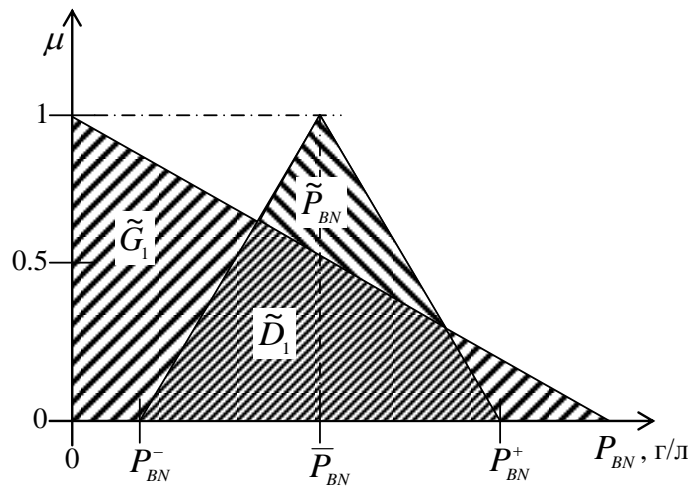


Рис. 3.12. Перетин нечіткої оцінки концентрації немонотонного побічного продукту  $\tilde{P}_{BN}(\vec{T}, t_{\max})$  з нечітким термом  $\tilde{G}_1$

Зменшення значення ваги  $\alpha_i$  “розмиває” функцію належності нечіткого терму  $\tilde{G}_i$ , послаблюючи його вплив. З використанням (3.27)–(3.29) одержимо зважений функціонал

$$Q(\vec{T}) = \sup_p \mu_{D1}[\alpha_1, \vec{T}, p] + \sup_p \mu_{D2}[\alpha_2, \vec{T}, p] + \sup_p \mu_{D3}[\alpha_3, \vec{T}, p] \rightarrow \max. \quad (3.30)$$

Як було досліджено в § 1.3 найкращими характеристиками збіжності на функціоналах з численними локальними екстремумами володіють генетичні алгоритми. Тому для розв’язання задачі (3.30) використано класичний однокритеріальний генетичний алгоритм та метод параметризації температурного профілю в лінійних сегментах із змінною тривалістю, ефективність якого досліджено в [31].

Другий підхід до формалізації задачі синтезу управління процесом з мінімальними інтенсивностями побічних продуктів та бажаною інтенсивністю основного, базується на підстановці їхніх дефазифікованих оцінок

безпосередньо в формули критеріїв та обмежень задачі в чіткій постановці (1.19), (1.20)

$$\begin{cases} \min_T f_1 = \min_T \hat{P}_{BN}(\vec{T}, t_{\max}), \\ \min_T f_2 = \min_T \hat{P}_{BM}(\vec{T}, t_{\max}), \end{cases} \quad (3.31)$$

$$P^- \leq \hat{P}(\vec{T}, t_{\max}) \leq P^+, \quad (3.32)$$

де  $\hat{P}(\vec{T}, t_{\max})$ ,  $\hat{P}_{BN}(\vec{T}, t_{\max})$  та  $\hat{P}_{BM}(\vec{T}, t_{\max})$  – дефазифіковані оцінки значень кінцевої інтенсивності основного та побічних продуктів  $\tilde{P}_{BN}(\vec{T}, t_{\max})$ ,  $\tilde{P}_{BM}(\vec{T}, t_{\max})$ ,  $\tilde{P}(\vec{T}, t_{\max})$  при застосуванні температурного профілю, закодованого у векторі  $\vec{T}$ . При дефазифікації слід утворювати такі точкові оцінки, які б найвідповідніше описували той чи інший нечіткий прогноз. Надалі називатимемо такі точкові оцінки очікуваними оцінками інтенсивності продуктів.

Для дефазифікації нечітких оцінок  $\tilde{P}_{BN}(\vec{T}, t_{\max})$ ,  $\tilde{P}_{BM}(\vec{T}, t_{\max})$ ,  $\tilde{P}(\vec{T}, t_{\max})$  в очікувані оцінки  $\hat{P}_{BN}(\vec{T}, t_{\max})$ ,  $\hat{P}_{BM}(\vec{T}, t_{\max})$  та  $\hat{P}(\vec{T}, t_{\max})$  було проаналізовано три методи:  $C=1$  – за максимумом вірогідності,  $C=2$  – за центром ваги (інша назва – метод центроїду) та  $C=3$  – за верхньою межею оцінки концентрації продукту [40, 114]

$$\begin{cases} \hat{P}(\vec{T}, t_{\max}); \\ \hat{P}_{BN}(\vec{T}, t_{\max}); \\ \hat{P}_{BM}(\vec{T}, t_{\max}) \end{cases} = \begin{cases} p \mid \max_p \mu(p), & C=1, \\ \frac{\int_{-\infty}^{\infty} p \mu(p) dp}{\int_{-\infty}^{\infty} \mu(p) dp}, & C=2, \\ \max p, & C=3, \end{cases} \quad (3.33)$$

де  $p$  – точкове значення концентрації відповідного продукту,  $\mu(p)$  – функція належності його нечіткої оцінки.

Два перші методи дефазифікації ( $C=\{1, 2\}$ ) могли б однаково добре підійти як для основного так і для побічних продуктів, тоді як останній ( $C=3$ ) більше

підходить для очікуваних оцінок побічних продуктів з метою одержання гарантованого виграшу за умови найменшого ризику.

Розв'язання оптимізаційної задачі (3.31), (3.32) полягає у пошуку таких параметрів температурного профілю  $\vec{T}$ , які б забезпечували мінімум очікуваних оцінок побічних продуктів із задоволенням обмеження на бажану оцінку основного продукту. Досвід розв'язання аналогічних задач в чіткій постановці свідчить про ефективність багатокритеріальних генетичних алгоритмів, див. §1.3. З метою їх застосування для розв'язання задачі в нечіткій постановці, що включає дві функції мети (3.31) та обмеження (3.32), необхідно звести її до екстремальної задачі без обмежень. Для цього введемо константу бажаного рівня основного продукту  $P^*$ , на основі якої обчислюватимемо штрафну функцію  $f_3$ , що описує її відхилення від очікуваної оцінки  $\hat{P}(\vec{T}, t_{\max})$

$$f_3 = \left| \hat{P}(\vec{T}, t_{\max}) - P^* \right|. \quad (3.34)$$

З метою контролю рівня невизначеності введемо додатковий критерій  $f_4$

$$f_4 = P^+(\vec{T}, t_{\max}) - P^-(\vec{T}, t_{\max}), \quad (3.35)$$

де  $P^+(\vec{T}, t_{\max}), P^-(\vec{T}, t_{\max})$  – верхня та нижня межі нечіткої оцінки очікуваної інтенсивності основного продукту.

Таким чином отримуємо багатокритеріальну задачу на екстремум без обмежень

$$\begin{cases} \min_{\vec{T}} f_1 = \min_{\vec{T}} \hat{P}_{BN}(\vec{T}, t_{\max}), \\ \min_{\vec{T}} f_2 = \min_{\vec{T}} \hat{P}_{BM}(\vec{T}, t_{\max}), \\ \min_{\vec{T}} f_3 = \min_{\vec{T}} \left| \hat{P}(\vec{T}, t_{\max}) - P^* \right|, \\ \min_{\vec{T}} f_4 = \min_{\vec{T}} P^+(\vec{T}, t_{\max}) - P^-(\vec{T}, t_{\max}). \end{cases} \quad (3.36)$$

На першому кроці побудови генетичного алгоритму необхідно параметри-

зувати температурний профіль у послідовності чисел, яка в термінах генетичного програмування називається стрічкою генів, що утворює хромосому. Для цього формалізуємо описаний в §1.3 метод лінійних сегментів із змінною тривалістю.

Нехай відомо діапазони зміни температур  $T^- \leq T_i \leq T^+$  і тривалостей часових інтервалів  $\Delta t^- \leq \Delta t_i \leq \Delta t^+$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ . В побудованому генетичному алгоритмі температурний профіль, представлений вектором  $\vec{T}$ , кодується послідовністю двійкових чисел, тобто стрічкою генів. Для запобігання її надлишковості значення тривалості інтервалів та температур записуються у формі різниці між кодованим значенням та нижньою межею відповідного параметру

$$g_i = \text{bin}(\Delta t_i) = \text{bin}(\Delta t_i - \Delta t^-), \quad i = 1, 2, \dots, N - 1, \quad (3.37)$$

$$g_{n-1+i} = \text{bin}(T_i) = \text{bin}(T_i - T^-), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (3.38)$$

де  $g_i$  – значення  $i$ -того гену хромосоми,  $\Delta t_i$ ,  $\text{bin}(\Delta t_i)$  – тривалість  $i$ -того інтервалу та її двійкове представлення,  $\Delta t^-$  – нижня межа тривалості інтервалу,  $T_i$ ,  $\text{bin}(T_i)$  – значення температури на кінці  $i$ -того інтервалу та її двійкове представлення,  $T^-$  – нижня межа діапазону значень температур.

Спеціальна процедура обчислює кількість двійкових розрядів, що визначають довжину гена кожного типу. Розв'язки задачі синтезу управління представляються хромосомами з закодованою в них множиною параметрів температурних профілів.

При кодуванні температурного профілю слід також враховувати фізичні обмеження ХТС. В промислових ХТС найчастіше використовуються реактори з одним колом регулювання температури – для охолодження, рідше зустрічаються реактори з двома колами регулювання температури: одне – для охолодження, інше – для нагрівання. Підвищення температури в реакторах з одним колом регулювання відбувається за рахунок екзотермічної дії реакції процесу. При включенні охолоджуючого кола реактора екзотермічна дія реакції припиняється і температура не може більше підніматися. В літературі цей факт отримав назву

“правила однократного нагріву” (“Increase Once Rule”) [125]. Для забезпечення виконання даного правила розроблено спеціальні процедури генерування початкової популяції та хромосом-емігрантів, а також схрещування і мутації. Крім того генетичний алгоритм організовано так, щоб користувач міг ввімкнути або вимкнути опцію врахування цього правила залежно від наявності одного чи двох кіл регулювання температури в конкретній ХТС.

Перед виконанням алгоритму виконується ініціювання давача псевдовипадкових послідовностей. Це робиться для забезпечення можливості повторення обчислювальних експериментів та усунення впливу “випадковостей” при настроюванні параметрів генетичного алгоритму. До цих параметрів належать: об’єм популяції, вид генетичних операторів та ймовірності їх виконання, кількість точок схрещування та інші.

На початку своєї роботи генетичний алгоритм формує початкову популяцію хромосом, яка включає випадково згенеровані хромосоми та найпростіші температурні режими. Процедура випадкового генерування хромосом полягає у встановленні генів кожної хромосоми відповідно до показників давача псевдовипадкових чисел. А найпростіші температурні профілі – це режими управління, які часто зустрічаються в промислових умовах і мають стаціонарний характер, тобто ізотермічні.

На другому етапі для кожної з хромосом популяції оцінюється значення її пристосованості (фітнес-функції). Це значення повинне бути тим більшим, чим кращим є розв’язок задачі, представлений тією чи іншою хромосомою. Пристосованість рівноцінних розв’язків повинна бути однаковою. Для оцінювання пристосованості використано підхід зваженої суми пронормованих критеріїв.

Спочатку для всіх хромосом-температурних профілів  $\bar{T}$  в популяції обчислюється значення критеріїв інтенсивності побічних продуктів  $f_1, f_2$ , функції штрафу  $f_3$  мінімізації відхилення між очікуваним та необхідним рівнями основного продукту та контролю ширини інтервалу невизначеності  $f_4$  згідно (3.36). Після цього проводиться нормування значень обчислених критеріїв в діапазоні від 0 до 1 по всіх хромосомах популяції

$$nf_i^l = \frac{f_i^l - f_i^-}{f_i^+ - f_i^-}, \quad i = \overline{1,4}, \quad (3.39)$$

де  $f_i^- = \min_l f_i^l$ ;  $f_i^+ = \max_l f_i^l$  – мінімальне та максимальне значення  $i$ -того критерію задачі в поточній популяції хромосом,  $f_i^l$ ,  $nf_i^l$  – непрономоване і прономоване значення  $i$ -того критерію для  $l$ -тої хромосоми.

Остаточна оцінка пристосованості  $l$ -тої хромосоми дорівнює зваженій сумі прономованих критеріїв

$$F(nf_1^l, nf_2^l, nf_3^l, nf_4^l) = 1 - \frac{\alpha_1 nf_1^l + \alpha_2 nf_2^l + \alpha_3 nf_3^l + \alpha_4 nf_4^l}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4}, \quad (3.40)$$

де  $F(\dots)$  – оцінка пристосованості хромосоми;  $nf_1^l, nf_2^l, nf_3^l, nf_4^l$  – нормовані в діапазоні від 0 до 1 значення критеріїв  $f_1^l, f_2^l, f_3^l, f_4^l$ ;  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$  – коефіцієнти відносної ваги критеріїв.

Після оцінювання пристосованості проводиться виключення з популяції тих хромосом, які не забезпечують виконання жорсткої умови на бажану інтенсивність основного продукту (3.32). Крім того, спеціальна процедура здійснює відбір тих температурних профілів, які створюють Паретову множину розв'язків. Ця процедура ґрунтується на методі маркування домінантних розв'язків, що описано в [69].

На третьому етапі виконується селекція хромосом для схрещування, які включаються в популяцію нової генерації. Селекція виконується послідовним вибором пар батьківських хромосом за правилом „колеса рулетки”. Згідно цього правила ймовірність вибору тієї чи іншої хромосоми пропорційна оцінці її пристосованості (ширині сектора рулетки)

$$p_k = \frac{F(nf_1^k, nf_2^k, nf_3^k, nf_4^k) + 1}{\sum_{j=1}^{N_{POP}} [F(nf_1^j, nf_2^j, nf_3^j, nf_4^k) + 1]}, \quad (3.41)$$

де  $p_k$  – ймовірність селекції  $k$ -тої хромосоми,  $F(nf_1^k, nf_2^k, nf_3^k, nf_4^k)$  – оцінка

пристосованості  $k$ -тої хромосоми,  $N_{POP}$  – кількість хромосом в популяції.

Вибрані пари батьківських хромосом беруть участь при формуванні нових хромосом-розв'язків за допомогою процедур схрещування і мутації. Схрещування відбувається з ймовірністю  $p_{crossover}$ , тобто з ймовірністю  $(1 - p_{crossover})$  хромосоми-нащадки є точними копіями своїх “батьків”. Процедури схрещування та мутації організовані за класичними схемами. А саме: випадковим чином вибирається задана кількість точок схрещування  $N_{cros}$ , на основі двох батьківських хромосом формуються дві дочірні шляхом копіювання стрічки генів з першої батьківської хромосоми в першу дочірню, а з другої батьківської хромосоми в другу дочірню. В кожній точці схрещування порядок копіювання замінюється на протилежний, тобто гени першої батьківської хромосоми переходять в другу дочірню і навпаки. Ілюстрація процедури односточкового схрещування зображена на рис. 3.13. При копіюванні генів батьківських хромосом в хромосоми нащадків з заданою ймовірністю  $p_{mutation}$  виконується процедура мутації, яка змінює значення відповідного двійкового гена на протилежне (виконується оператор двійкової інверсії).

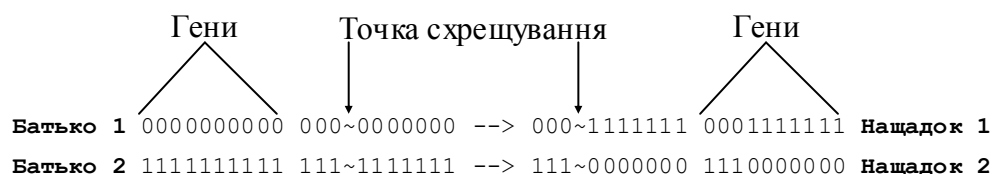


Рис. 3.13. Ілюстрація процедури односточкового схрещування

Нова генерація складається з хромосом, отриманих після схрещування та хромосом-емігрантів (випадково згенерованих температурних профілів, як при формуванні початкової популяції). Критерієм зупинки генетичного алгоритму виступає задана кількість генерацій  $I_{MAX}$ . При необхідності процес роботи генетичного алгоритму може бути продовжений від точки попереднього зупину.

Після відпрацювання алгоритму отримується наближення множини Парето-оптимальних розв'язків. З неї усуваються розв'язки, що не

задовольняють обмеженню задачі (3.32).

Для успішного виконання генетичного алгоритму необхідно налаштувати його параметри. До цих параметрів належать вагові коефіцієнти  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$  в функції оцінювання пристосованості (3.40),  $N_{POP}|_{I=0}$  – кількість особин в початковій популяції,  $I_{MAX}$  – гранична кількість поколінь (генерацій), кількості емігрантів і нащадків в популяції, а також ймовірності мутації  $p_{mutation}$ , схрещування  $p_{crossover}$  та кількість її точок  $N_{cros}$ . Встановлення конкретних значень параметрів можна здійснювати як емпірично, так і використовуючи рекомендації літературних джерел, що обговорено в §4.4.

Множина Парето-оптимальних розв'язків, що отримується після відпрацювання генетичного алгоритму може налічувати сотні елементів. Необхідно вибрати ті з них, які дозволяють найефективніше розв'язати екстремальну задачу в конкретному випадку. Для виконання цього завдання побудовано спеціальну процедуру.

Процедура полягає у нормуванні множини розв'язків. Найкращим розв'язком вважається той, норма якого мінімальна. Ця процедура враховує як об'єктивні характеристики розхилу значень функцій мети, так і набір заданих користувачем відносних пріоритетів. Критерії, що можуть досягти 0 нормуються своїм значенням, а ті критерії, що не досягають нуля – діапазоном можливих значень. Розглянемо цю процедуру детальніше.

В чотиривимірному метричному просторі можливих значень цільових функцій мети Парето-оптимальних розв'язків  $\vec{F} = (f_1, f_2, f_3, f_4) \in R^4$  задачі (3.31), (3.32) введемо норму

$$\|\vec{F}\|_{\beta} = \sqrt{(f_1 \xi_1)^2 + (f_2 \xi_2)^2 + (f_3 \xi_3)^2 + (f_4 \xi_4)^2}, \quad (3.42)$$

де  $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$  – ваги метрики, що обчислюються за формулою

$$\xi_j = \frac{\beta_j}{\max_{\Psi} f_j - \min_{\Psi} f_j}, \quad j = [1, 2, 4], \quad \xi_3 = \frac{\beta_3}{\max_{\Psi} f_3}, \quad (3.43)$$



$\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4 \geq 0$  – коефіцієнти відносної важливості відповідних функцій мети.

Найкращим вважається той розв'язок, норма якого (3.42) досягає мінімуму. При використанні даної процедури існує проблема вибору значень ваг на відносний пріоритет критеріїв  $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$ . На початковому етапі пошуку найкращої їх комбінації можна покласти  $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \beta_4 = 1$ . Якщо отриманий при цих базових значеннях результат не задовольняє дослідника, то спостерігши котрий з критеріїв програє у порівнянні з іншими і збільшивши його вагу отримаємо новий результат. Коли і він не є задовільним, то підняття ваги на програючі критерії повторюється до досягнення бажаного співвідношення їх значень  $f_1, f_2, f_3, f_4$  або до моменту, коли наступне підвищення ваги того чи іншого критерію призведе до програшу по значеннях решти критеріїв, що свідчитиме про знаходження сідлової точки. Тоді оптимальний розв'язок знаходиться в цій сідловій точці. Слід зауважити, що будь-яке співвідношення ваг  $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$  дає Парето-оптимальний розв'язок, тому всі описані вище перевірки “ефективності” того чи іншого розв'язку ґрунтуються на суб'єктивних вподобаннях дослідника та конкретних умовах технологічного процесу.

Запропонований в даному параграфі генетичний алгоритм та метод нормування множини Парето-оптимальних розв'язків апробовано на задачах синтезу управління ХТП броварного бродіння з мінімальними інтенсивностями побічних продуктів в §4.4.

### 3.4. Висновки третього розділу

1. Проаналізовано невизначеність динаміки періодичних процесів в системах Моно-Іерусалимського, яка характеризується розходженням траєкторій концентрації субстрату до 49.09 % і суттєвою відмінністю їх форми. Описано відомі методи її врахування із відзначенням переваг адаптивних моделей. Зроблено висновки щодо неможливості застосування адаптивних моделей неперервних процесів для прогнозування динаміки періодичних процесів. Вказано на неповноту відомої адаптивної моделі періодичних процесів, що

пов'язана з врахуванням невизначеності лише одного параметру в рівнянні стану побічного продукту.

2. Розроблено математичну модель нечітких процесів в системах Моно-Ієрусалимського, яка прогнозує їх динаміку у вигляді нечітких траєкторій змінних стану з трикутними функціями належності. При прогнозуванні враховується вплив температурного профілю процесу. Нечіткі траєкторії формуються на основі агрегату точкових моделей, параметри яких ідентифіковано з використанням підходу, запропонованого в §§2.1, 2.2.

3. Розроблено алгоритм адаптивного уточнення оцінок вищезгаданої моделі в міру нагромадження експериментальних спостережень динаміки процесу. Функціонування алгоритму ґрунтується на співставленні значень спостережень з оцінками середньої та межових траєкторій агрегату точкових моделей, на основі чого уточнюється склад агрегату шляхом вилучення частини межових точкових моделей. Поєднання даного алгоритму з моделлю нечітких процесів утворює адаптивну модель нечітких процесів.

4. Розглянуто випадки виходу спостереження за межі коридору нечіткої траєкторії та проходження процесу в околі середньої траєкторії, які можуть призвести до втрати моделлю адаптивних якостей. Розроблено принцип адаптації нечіткої траєкторії в цих випадках.

5. Розроблено метод ідентифікації математичної моделі систем Моно-Ієрусалимського з мінімальними інтенсивностями побічних продуктів в умовах невизначеності. Цей метод засновано на адаптивній моделі нечітких процесів та генетичному алгоритмі; на відміну від існуючих, він враховує невизначеності оцінок як основного, так і побічних продуктів.

6. Розроблено спеціальний метод нормування множини Парето-оптимальних розв'язків задачі ідентифікації моделі систем Моно-Ієрусалимського з мінімальними концентраціями побічних продуктів. Він враховує як об'єктивні особливості розхилу значень критеріїв задачі так і задані користувачем пріоритети. Його використання дозволяє знаходити оптимальні умови проведення технологічних процесів та виявляти напрямки їх покращення.

## РОЗДІЛ 4

### ЧИСЕЛЬНІ ЕКСПЕРИМЕНТИ З МОДЕЛЯМИ ХТС

#### **4.1. Математичне моделювання процесів бродіння browарної та виноробної промисловостей**

Розроблені математичні моделі та методи апробовано на технологічних процесах browарної і виноробної промисловостей. Ці процеси складаються з трьох основних етапів: підготовки сировини та обладнання, бродіння та зберігання готових виробів. Підготовка сировини та обладнання передбачає культивування системи мікроорганізмів (чистої культури дріжджів), приготування поживного субстрату та дезінфікування ферментаційних ємностей (ХТС). Бродіння відбувається після внесення в закриті ферментаційні ємності поживного субстрату та системи мікроорганізмів. Воно може складатися з кількох періодів: основного бродіння, доброджування, дозрівання. Готові вироби зберігаються в мікробіологічно-чистих ємностях при певному температурному режимі із можливою попередньою пастеризацією чи стерилізацією, що мінімізує ризик їхнього зіпсуття внаслідок мікробіологічного інфікування [14].

Всі перелічені етапи характерні як для browарної, так і для виноробної промисловості. Однак процеси підготовки поживного субстрату і умови зберігання готових виробів в browарному та виноробному виробництві суттєво відрізняються. В browарному виробництві проводиться варіння субстрату з метою оцукрення крохмалю, який присутній в суслі, що збагачує його поживною сахарозою, життєво-необхідною для розвитку систем мікроорганізмів [14]. У виноробному виробництві варіння субстрату не проводиться [60]. Оскільки варіння субстрату еквівалентне його стерилізації, то субстрат в browарному виробництві мікробіологічно-чистіший у порівнянні з субстратом виноробної промисловості. Тому поживний субстрат виноробної промисловості може містити сторонні системи мікроорганізмів класу *Brettanomyces*, які здатні викликати зіпсуття готових виробів, продукуючи шкідливі побічні домішки.

Ці сторонні системи мікроорганізмів містяться на шкірці виноградних плодів і потрапляють туди через комах, в основному мухи дрозоділу меланогастер [78].

Розроблені математичні моделі і методи їх ідентифікації запропоновано використовувати для вирішення актуальних задач моніторингу та управління динамікою процесів броварного і виноробного бродіння. При проведенні процесів броварного бродіння актуальною є задача зменшення інтенсивностей побічних продуктів, які негативно позначаються на смакових і ароматичних якостях готових виробів [4, 8, 122]. В той же час при виконанні процесів виноробного бродіння актуальною є задача пригнічення розвитку сторонніх систем мікроорганізмів шляхом внесення додаткового об'єму основного продукту [101].

З метою розв'язання актуальних задач броварної промисловості можна скористатися математичною моделлю технологічних процесів з мінімальною інтенсивністю побічних продуктів, що розроблена в §3.3. Базою для її функціонування виступає нечітка модель та методи її адаптивної ідентифікації, розглянуті в §§3.1, 3.2. Побудова нечіткої моделі передбачає параметричну ідентифікацію множини термодерованих точкових моделей по сукупності траєкторій спостережених раніше ХТП за допомогою методів, описаних в §§2.1, 2.3.

В броварному бродінні важливий вплив на якість виробу має монотонний побічний продукт – етилацетат та немонотонний побічний продукт – діацетил. Етилацетат у концентраціях, що перевищують органолептичний поріг (поріг сприйняття органами чуття людини) надає виробу присмаку і запаху ацетону. А діацетил у концентраціях, що перевищують органолептичний поріг в 0.1 г/л надає кінцевому виробу смаку прогірклого масла [79, 100, 106].

В літературі описано моделі для оцінювання динаміки концентрації етилацетату та діацетилю. Вони ґрунтуються на підстановці відповідних функцій Арреніуса в модельні рівняння (1.17) та (1.18), що описані в першому розділі. Модель монотонного побічного продукту броварної промисловості

(етилацетату) записується при підстановці в рівняння (1.17) функції Арреніуса (1.47) від температури реакції [81]

$$HS_{BM}[S(t), T(t), t] = H_8[1, T(t)]. \quad (4.1)$$

Модель немонотонного побічного продукту – діацетилу записується при підстановці в рівняння (1.18) функцій Арреніуса (1.47) залежності швидкості синтезу від поточної концентрації субстрату  $S(t)$  та швидкості розкладу від температури реакції  $T(t)$

$$HS_{BN}[S(t), T(t), t] = H_9[-1, S(t)], \quad (4.2)$$

$$HD_{BN}[S(t), T(t), t] = H_{10}[-1, -T(t)]. \quad (4.3)$$

Після підстановки співвідношень (4.1)–(4.3) в рівняння (1.17), (1.18) та в загальну систему диференціальних рівнянь (2.48) отримаємо

$$\begin{cases} X'(t) = (H_1[1, T(t)]H_G[T(t), S(t), P(t)] - H_2[1, T(t)])X(t), \\ S'(t) = -H_3[1, T(t)] \frac{S(t)}{H_4[1, T(t)] + S(t)} X(t), \\ P'(t) = -H_7[1, T(t)]S'(t), \\ P'_{BM}(t) = -H_8[1, T(t)]S'(t), \\ P'_{BN}(t) = -H_9[-1, S(t)]S'(t) - H_{10}[-1, -T(t)]P_{BN}(t). \end{cases} \quad (4.4)$$

Система диференціальних рівнянь (4.4) буде використана в §4.4 для розв'язання задачі синтезу управління технологічним процесом броварного бродіння з мінімальними інтенсивностями побічних продуктів.

В процесах виноробного бродіння також утворюються діацетил та етилацетат. Однак зіпсуття виробу внаслідок перевищення їх органолептичного порогу відбувається досить рідко. Натомість там існує небезпека інфікування сторонніми системами мікроорганізмів, в основному класу *Brettanomyces*. Інфікування відбувається у випадку, коли побічні системи мікроорганізмів розвиваються надто інтенсивно на будь-якій стадії процесу. Ризик інфікування

особливо високий для процесів бродіння із низькою швидкістю перебігу, оскільки та система мікроорганізмів, яка адаптується швидше за інші продовжує домінувати в даному середовищі, витісняючи інші [101]. Внаслідок інфікування кінцевий виріб набуває небажаного запаху шкіряного одягу або кінського поту [80].

Для усунення ризику інфікування в середовище вносять деякий об'єм основного продукту  $P(t) = P_0$  на початку процесу  $t = 0$ , що пригнічує розвиток побічних систем мікроорганізмів і дещо пригальмовує розвиток основної системи мікроорганізмів. Актуальною задачею математичного моделювання в цьому випадку є вибір такого об'єму основного продукту, який би дозволив знешкодити побічні системи мікроорганізмів, не завадивши при цьому нормальному розвитку основної системи мікроорганізмів і зберігши бажаний рівень основного продукту в кінцевому виробі. Базою для моделювання таких процесів виступає математична модель, розроблена в §2.2. Проведені дослідження засвідчують її структурну стійкість. Вона дозволяє моделювати динаміку процесів при довільній початковій концентрації основного продукту.

На основі запропонованих в дисертації методів ідентифікації точкових та адаптивної нечіткої моделей розроблено програмне забезпечення в середовищі MATLAB. Воно складається з наступних модулів: модуля параметричної ідентифікації точкових моделей, модуля структурної ідентифікації керованих зворотнім зв'язком моделей, модуля адаптивного прогнозування нечітких процесів та модуля синтезу управління технологічними процесами з мінімальними концентраціями побічних продуктів.

Модуль параметричної ідентифікації точкових моделей дозволяє виконувати ідентифікацію сімейства автономних та термочерованих моделей як по виробничих так і по теоретичних траєкторіях, а також аналізувати збіжність процедури ідентифікації при використанні різних схем, алгоритмів, значень початкового наближення і регуляризуючого параметра (див. §§2.1, 2.3). Таблиці експериментальних даних та значень ідентифікованих параметрів зберігаються в базі даних. В результаті ідентифікації за тією чи іншою схемою та початковим

наближенням в базі даних нагромаджується множина наборів параметрів та динаміка похибок ідентифікації. Це дозволяє автоматично зберігати результати досліджень і повертатися до їх аналізу згодом. Набори параметрів можна порівнювати між собою за допомогою графіків і таблиць траєкторій та динаміки похибок збіжності. При зображенні графіків існує можливість налаштовувати тип і колір ліній траєкторій. Вигляд діалогового вікна даного модуля наведено в додатку В.

Модуль структурної ідентифікації керованих зворотнім зв'язком моделей дозволяє аналізувати адекватність і структурну стійкість запропонованої в §2.2 точкової моделі з керованим зворотнім зв'язком. З цією метою там існує можливість зображення таблиць значень коефіцієнтів і графіків траєкторій концентрації мікроорганізмів при довільних початкових інтенсивностях основного продукту.

Модуль адаптивного прогнозування нечітких процесів дозволяє проводити дослідження адекватності і точності прогнозування теоретичних та виробничих траєкторій нечітких процесів в ХТС Моно-Ієрусалимського з використанням запропонованої в §§3.1, 3.2 адаптивної моделі на основі агрегату точкових моделей. Робота даного модуля можлива лише після формування агрегату точкових моделей за допомогою модуля параметричної ідентифікації точкових моделей. Модуль адаптивного прогнозування нечітких процесів дає можливість прогнозувати динаміку двох видів виробничих траєкторій. Перший вид виробничих траєкторій – це траєкторії контрольної вибірки, що відбувалися раніше в промислових умовах і використовуються для верифікації моделі. Другий вид виробничих траєкторій – це траєкторії нових технологічних процесів, які не спостерігалися раніше. Лістинг основних процедур даного модуля наведено в додатку Ж.

Модуль синтезу управління технологічними процесами з мінімальними концентраціями побічних продуктів – це допоміжний модуль для розширення функцій попереднього. Він призначений для пошуку таких умов процесу, які б дозволили провести новий технологічний процес так, щоб кінцеві концентрації

його побічних продуктів були мінімальні і забезпечувалася бажана концентрація основного продукту.

#### 4.2. Чисельні експерименти параметричної ідентифікації моделей частково спостережуваних ХТС

В цьому параграфі проводиться дослідження з метою визначення ефективної процедури параметричної ідентифікації точкових автономних моделей ХТС в умовах неповної спостережуваності. Дослідження проведено на задачах ідентифікації за даними як модельних так і виробничих процесів. Модельні задачі параметричної ідентифікації організовано наступним чином. З використанням [51–53, 62] побудовано три модельні траєкторії концентрації субстрату  $S(t)$  і мікроорганізмів  $X(t)$  за відомими параметрами моделі зі зворотнім зв'язком Моно-Торо (1.9), (1.16) для трьох ізотермічних режимів: 8 °С, 12 °С та 16 °С, див. рис. 4.1.

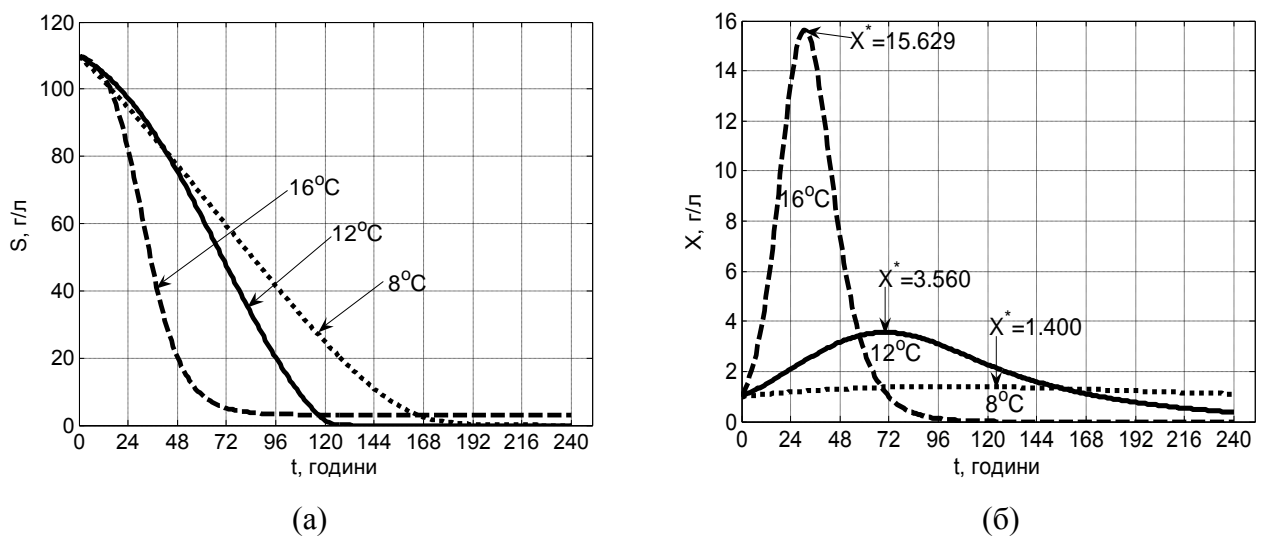


Рис. 4.1. Модельні траєкторії концентрації субстрату  $S(t)$  (а)

та мікроорганізмів  $X(t)$  (б)

Час кожної модельної траєкторії субстрату  $S(t)$  – рис. 4.1 (а) вкривається сіткою з  $N + 1$  дискретних вузлів  $t_i$

$$S_{real}(t_i) = S_{sim}(\vec{P}^*, t_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, N, \quad (4.5)$$



тривалість інтервалів між сусідніми вузлами складає 24 години

$$t_i - t_{i-1} = 24 \text{ години}, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (4.6)$$

де  $\vec{P}^*$  – значення параметрів по яких будується траєкторія модельної задачі,  $S_{sim}(\vec{P}, t_i)$  – модельна оцінка концентрації субстрату в часовому вузлі  $t_i$ , що є розв’язком задачі Коші (1.9), (1.10) з використанням істинних параметрів  $\vec{P}^*$ .

При проведенні ідентифікації істинні значення параметрів  $\vec{P}^*$ , по яких будуються траєкторії модельних задач і траєкторії концентрації мікроорганізмів  $X(t)$  (рис. 4.1 (б)) вважаються невідомими. Це наближає модельну задачу до промислових умов, де змінна  $X(t)$  неспостережувана. Параметрична ідентифікація проводиться лише по відомих траєкторіях концентрації субстрату  $S(t)$  (4.5), які вважаються експериментально вимірними, що дозволяє зімітувати процес нагромадження спостережень динаміки процесу раз на добу, як це практикується у виробничих умовах. Як згадувалося в §2.1, в такій постановці задача параметричної ідентифікації некоректна. Тому для її регуляризації приймається наближена оцінка максимальної концентрації мікроорганізмів  $X_{real}^*$  в (2.3). Вона використовується також в методі початкового наближення невідомих значень параметрів сімейства автономних моделей (2.6)–(2.13).

Для виявлення оптимальної процедури параметричної ідентифікації проведено дослідження збіжності трьох градієнтних оптимізаційних алгоритмів: Левенберга-Маркварта, Бройдена-Флетчера та Нелдера-Міда від двох початкових наближень: одиничного та згенерованого запропонованим в §2.1 методом початкового оцінювання значень параметрів. Одиничне початкове наближення (англ. uniform standard guess) – це широко використовувана оцінка, що дорівнює одиничному вектору.

Алгоритм Левенберга-Маркварта розроблено спеціально для мінімізації суми квадратів відхилень модельних оцінок від емпіричних значень [104]. Алгоритм Бройдена-Флетчера є однією із реалізацій методу змінної метрики,

який належить до класу квазі-ньютонівських [127]. Алгоритм Нелдера-Міда є версією методу деформованого многогранника, що належить до методів прямого пошуку [93].

Оскільки задача параметричної ідентифікації зводиться до оптимізаційної задачі високої розмірності (від четвертого до шостого порядку, залежно від виду зворотнього зв'язку в сімействі автономних моделей (2.6)–(2.13)), було проведено додаткові дослідження, яким чином можна покращити збіжність процедури ідентифікації за рахунок розбиття загальної задачі на послідовність підзадач з меншою розмірністю. В кожній підзадачі проводиться уточнення значень невеликої групи коефіцієнтів. Результат однієї підзадачі подається як початкове наближення при розв'язку наступної. Таким чином розв'язок окремої підзадачі – це один з етапів розв'язку загальної задачі параметричної ідентифікації. Множину підзадач, на які розбивається основна задача надалі називатимемо схемою параметричної ідентифікації.

В процедурі обчислення початкового наближення для оцінювання коефіцієнтів  $A_1$  та  $A_2$  використовуються неточні допущення про динаміку неспостережуваної траєкторії концентрації мікроорганізмів  $X(t)$ , що полягають в оцінках  $X^*$ ,  $X(0.5t^*)$  та похідної  $X'(0.5t^*)$  (див. (2.30), (2.31)), тоді як для оцінювання коефіцієнтів  $A_3$  і  $A_4$  використано набагато точніші співвідношення (2.13), (2.14) на основі спостережуваної траєкторії концентрації субстрату (4.6), (4.5). Тому можна висловити гіпотезу, що в першу чергу потрібно проводити уточнення тих коефіцієнтів, які цього більше потребують, тобто  $A_1$  та  $A_2$  а згодом і решти модельних коефіцієнтів.

Аналіз результатів модельних задач ідентифікації показав, що від одиничного наближення жоден з трьох досліджуваних оптимізаційних алгоритмів не збігається до справжнього розв'язку модельної задачі. В той же час ті самі алгоритми показали повну збіжність із справжнім розв'язком при застосуванні згенерованого за методом параграфу 2.1 початкового наближення, що свідчить про його ефективність. Також встановлено, що все досліджуване

сімейство моделей із зворотнім зв'язком (2.6)–(2.13) забезпечують практично однакову точність. Тому за критерієм простоти представлення для подальших досліджень слід рекомендувати модель Моно-Торо.

При дослідженні різних схем ідентифікації виявилось, що найкращий ефект отримується при використанні однієї з двох схем ідентифікації: (1) уточнення одразу всіх модельних коефіцієнтів  $A_1, A_2, \dots, A_7$  (найпростіша схема); (2) уточнення в три етапи: на першому уточнювати значення коефіцієнтів  $A_1$  та  $A_2$ , на другому етапі уточнювати значення коефіцієнтів  $A_3$  і  $A_4$ , а на останньому, третьому етапі – додатково уточнювати значення всіх модельних коефіцієнтів  $A_1, A_2, \dots, A_7$ . Застосування будь-яких інших схем ідентифікації, зокрема двоетапних, призводить до гіршої збіжності. Це підтвердило висловлену в §2.3 гіпотезу про ефективну схему ідентифікації.

Оцінювання похибок ідентифікації проводиться за формулами

$$X_{\max.\text{err.}}(\vec{P}) = \sup_{t \in [0, t_{\max}]} |X_{\text{sim}}(\vec{P}, t) - X_{\text{real}}(t)|, \quad (4.7)$$

$$X_{\text{std.err.}}(\vec{P}) = \frac{1}{t_{\max}} \int_0^{t_{\max}} |X_{\text{sim}}(\vec{P}, t) - X_{\text{real}}(t)| dt, \quad (4.8)$$

$$S_{\max.\text{err.}}(\vec{P}) = \max_{i=0, N} |S_{\text{sim}}(\vec{P}, t_i) - S_{\text{real}}(t_i)|, \quad (4.9)$$

$$S_{\text{std.err.}}(\vec{P}) = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N |S_{\text{sim}}(\vec{P}, t_i) - S_{\text{real}}(t_i)|. \quad (4.10)$$

де  $X_{\text{sim}}(\vec{P}, t)$  – модельна оцінка концентрації мікроорганізмів в час  $t$  при встановлені значень ідентифікованих параметрів моделі відповідно до вектора  $\vec{P}$ ,  $X_{\text{real}}(t)$  – справжнє значення концентрації мікроорганізмів згідно розв'язку модельної задачі,  $S_{\text{sim}}(\vec{P}, t_i)$  – модельна оцінка концентрації субстрату в часовому вузлі  $t_i$ , що є розв'язком задачі Коші (1.9), (1.10) при використанні вектора параметрів  $\vec{P}$ ,  $S_{\text{real}}(t_i)$  – імітація спостереженого значення концентрації субстрату в часовому вузлі  $t_i$ , по якому проводиться ідентифікація.

Результати збіжності трьох алгоритмів від згенерованого початкового наближення наведено в табл. 4.1. З таблиці видно, що алгоритм Левенберга-Маркварта показав найменші похибки ідентифікації модельних траєкторій 8, 12 і 16 °С. В той же час алгоритм Нелдера-Міда показав аналогічну збіжність на траєкторіях 8, 12 °С, а на траєкторії 16 °С потрапив в точку локального екстремуму. Алгоритм Бройдена-Флетчера заходить в точку локального екстремуму при ідентифікації усіх трьох модельних траєкторій. Наведені результати свідчать про перевагу алгоритму Левенберга-Маркварта над іншими двома алгоритмами при розв'язанні задач даного класу.

Таблиця 4.1

Порівняння збіжності градієнтних алгоритмів при використанні  
трьох градієнтних оптимізаційних алгоритмів

Траєкторія	Алгоритм	$X_{\text{std.err.}}$	$S_{\text{max.err.}}$	Кількість ітерацій алгоритму до збіжності	Кількість обчислень функції мети
8 °С	Левенберг-Маркварт	0.000	0.000	12	98
	Бройден-Флетчер	0.280	0.686	14	320
	Нелдер-Мід	0.000	0.000	621	1054
12 °С	Левенберг-Маркварт	0.004	0.013	24	202
	Бройден-Флетчер	0.123	0.372	14	95
	Нелдер-Мід	0.004	0.013	251	422
16 °С	Левенберг-Маркварт	0.029	0.018	20	167
	Бройден-Флетчер	0.514	4.820	7	240
	Нелдер-Мід	2.804	4.841	130	251

Також встановлено, що алгоритм Левенберга-Маркварта вимагає значно меншу кількість обчислень функції мети ніж алгоритм Нелдера-Міда, див. стовпчик «Кількість обчислень функції мети» в табл. 4.1. Наприклад при ідентифікації модельної траєкторії 8 °С ці алгоритми дали однаковий результат, проте алгоритм Левенберга-Маркварта вимагав на це приблизно в 10 разів менше обчислень функції мети у порівнянні з алгоритмом Нелдера-Міда.

Аналіз схем ідентифікації показує, що при параметричній ідентифікації траєкторії 8 °С кращою збіжністю володіє перша (проста) схема, а на траєкторіях 12 та 16 °С кращий результат дала друга (трьохетапна) схема. Для

виявлення причини непостійності ефекту від використання першої схеми ідентифікації проведено три додаткові чисельні експерименти ідентифікації модельних траєкторій при 9, 10 та 11 °С.

З результатів додаткових експериментів, наведених в табл. 4.2, зроблено висновок, що друга схема ефективніша від першої у випадку, коли відношення максимальної концентрації мікроорганізмів  $X^*$  до початкової  $X_0$  перевищує 2.000 ( $X^*/X_0 > 2.000$ ). Коли це відношення знаходиться в діапазоні  $1.600 \leq X^*/X_0 \leq 2.000$ , то схеми 1 та 2 дають однакову збіжність. А при  $X^*/X_0 < 1.600$  ефективніше користуватися першою, простою схемою, оскільки її використання менш витратне з точки зору тривалості обчислень

$$\begin{cases} \text{схема1: } A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6, A_7, & \text{якщо } X^*/X_0 \leq 2.000, \\ \text{схема2: } A_1, A_2 \rightarrow A_3, A_4 \rightarrow A_1, A_2, \dots, A_7, & \text{якщо } X^*/X_0 > 2.000. \end{cases} \quad (4.11)$$

Таблиця 4.2

Результати ідентифікації з використанням алгоритму Левенберга-Маркварта та різних схем ідентифікації

Траєкторія	$X^*/X_0$	Номери збіжних схем	$X_{\text{std.err.}}$	$S_{\text{max.err.}}$	Кількість ітерацій алгоритму до збіжності	Кількість обчислень функції мети
8 °С	1.400	1	0.000	0.000	12	98
9 °С	1.634	1, 2	0.001	0.006	6	48
10 °С	1.947	1, 2	0.009	0.013	21	185
11 °С	2.662	2	0.009	0.008	164	1287
12 °С	3.560	2	0.010	0.017	30	238
16 °С	15.629	2	0.029	0.018	52	530

Виявлена закономірність показує, що коли відношення  $X^*/X_0$  достатньо великі, тобто присутні великі значення градієнтів змінної стану  $X(t)$ , то проста повна схема ідентифікації є недостатньо ефективною. Ці результати знову підтверджують висловлену гіпотезу про ефективну схему параметричної ідентифікації. На рис. 4.2 наведено графік ідентифікації динаміки неспостережуваної змінної концентрації мікроорганізмів  $X(t)$  по модельній траєкто-

рії  $S(t)$  для ізотермічного режиму  $11\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Горизонтальною пунктирною лінією показано оцінюване значення максимального значення  $X_{real}^* = 2.700$ , що не співпадає з дійсним значенням  $2.662$ , яке помічено стрілочкою. Це наближає модельні експерименти до промислових умов, де отримання точної оцінки  $X^*$  утруднене. Дрібним пунктиром зображено траєкторію початкового наближення. Ідентифікована за другою схемою траєкторія повністю збігається з модельною траєкторією  $X(t)$ , яку наведено суцільною лінією, що відповідає збіжності з істинним розв'язком задачі. Траєкторія ідентифікована за першою схемою, що відображена на рис. 4.2 лінією „крапка-пунктир” суттєво розходиться з модельною траєкторією. Це доводить ефективність застосування другої схеми при ідентифікації в даному випадку. Для решти модельних траєкторій:  $8, 9, 10, 12, 16\text{ }^{\circ}\text{C}$  одержано аналогічні за точністю результати, наведені в додатку Е.

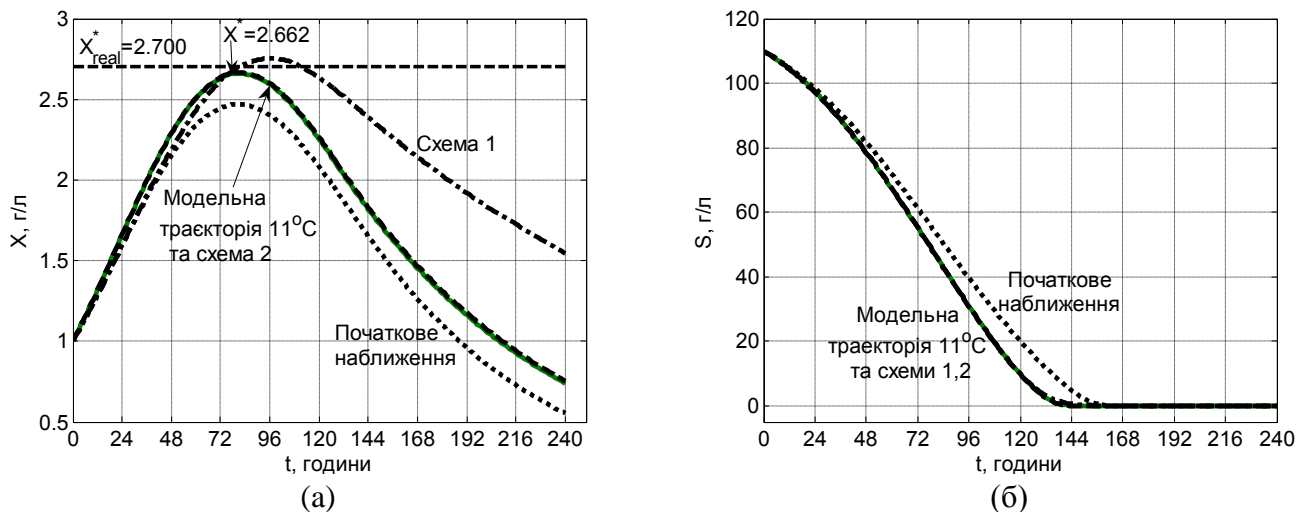


Рис. 4.2. Результат ідентифікації динаміки змінних стану  $X(t)$  (а) та  $S(t)$  (б) модельної траєкторії при  $11\text{ }^{\circ}\text{C}$

Дослідження впливу регуляризуючого параметру на модельних задачах позбавлене сенсу внаслідок значної гладкості модельних траєкторій. Тобто за рахунок гладкості задача коректна і не потребує регуляризації. Регуляризуючий доданок виявляється необхідним на задачах параметричної ідентифікації по виробничих траєкторіях. З результатів, наведених в табл. 4.3 можна зробити

висновок, що значення  $\alpha \in \{0.01; 0.10; 1.00\}$  замалі, а значення  $\alpha = 1000$  – завелике, оскільки призводять до зростання похибок ідентифікації по динаміці  $S(t)$ , а також до деякого збільшення похибки по динаміці  $X(t)$ . Найкращі результати спостерігаються для значень регуляризуючого параметру  $\alpha = 10$  та  $\alpha = 100$ , однак менші похибки досягаються при  $\alpha = 10$ , що приблизно дорівнює кількості експериментальних вимірів  $\alpha \approx N \approx 10$ . Аналогічні результати отримано і для решти досліджуваних виробничих траєкторій, що показано в додатку Д.

Таблиця 4.3

Вплив регуляризуючого параметру  $\alpha$  на ідентифікацію моделі Моно-Торо по виробничій траєкторії

$\alpha$	$X_{\max.\text{err.}}$	$S_{\max.\text{err.}}$	$S_{\text{std.err.}}$	$A_1$	$A_2$	$A_3$	$A_4$	$A_5$
0.01	1.609	2.180	1.220	0.033	0.033	0.158	1.097	55.000
0.10	1.400	2.057	1.233	0.033	0.033	0.153	1.097	55.000
1.00	0.025	2.507	1.318	0.038	0.037	0.129	1.097	55.000
10.00	0.000	2.526	1.316	0.038	0.037	0.128	1.098	54.999
100.00	0.000	2.578	1.329	0.038	0.037	0.128	1.096	55.000
1000.00	0.036	13.466	6.817	0.047	0.053	0.117	1.098	55.000

Апробацію підходу до ідентифікації термодерованих точкових моделей здійснено як на модельних так і на виробничих траєкторіях. Роботу процедури параметричної ідентифікації організовано так, як було описано в §2.3, тобто початкові оцінки значень коефіцієнтів функцій Арреніуса в термодерованій системі обчислювалися на основі результатів ідентифікації автономної системи по тих самих траєкторіях  $S(t)$  шляхом їх підстановки в формулу (2.56). При цьому для оцінювання значення характерної температури реакції  $T^*$  випробувано всі описані в параграфі 2.3 методи: простого середнього (2.57), максимуму (2.58) та мінімуму (2.59) по температурному профілю процесу. Дослідження отриманих результатів показують, що всупереч висловленим припущенням оцінка за простим середнім по температурному профілю процесу не дозволяє отримати початкове наближення, яке б забезпечувало збіжність

процедури ідентифікації до істинного розв'язку. Це ж саме стосується і оцінок за мінімальною температурою реакції. Натомість збіжність забезпечується для всіх виробничих і модельних траєкторій при застосуванні оцінки  $T^*$  по максимальній температурі реакції (2.58). Розглянемо отримані з її використанням результати детальніше.

В таблиці 4.4 подано чисельні результати ідентифікації одної модельної та двох виробничих траєкторій концентрації субстрату. В її стрічках « $S_{\max, \text{err.}}$ » та « $S_{\text{std, err.}}$ » наведено максимальне і середньоквадратичне відхилення похибки по траєкторії субстрату  $S(t)$ , які обчислюються за формулами (4.9), (4.10). Похибки ідентифікації суттєво зменшилися після уточнення значень параметрів за допомогою оптимізаційного алгоритму, що видно при порівнянні значень в стрічках « $S_{\max, \text{err.}}$ » і « $S_{\text{std, err.}}$ » навпроти стовпчиків «Поч.» та «Уточ.».

Таблиця 4.4

Результати ідентифікації термодерованої моделі для одної модельної та двох виробничих траєкторій

Значення	Модельна траєкторія		Література [52, 62]	Виробнича траєкторія 1		Виробнича траєкторія 2	
	Поч.	Уточ.		Поч.	Уточ.	Поч.	Уточ.
$S_{\max, \text{err.}}$	35.82	0.73	–	7.73	2.10	1.57	1.28
$S_{\text{std, err.}}$	13.71	0.30	–	4.90	1.05	0.75	0.42
$C_1$	107.42	108.29	108.31	108.40	108.58	107.63	108.00
$C_2$	129.45	130.14	130.16	130.64	130.83	129.65	129.76
$C_3$	-41.76	-41.90	-41.92	-42.20	-42.19	-41.15	-41.36
$C_4$	-119.18	-119.49	-119.63	-117.76	-121.13	-120.45	-118.41
$E_1$	-31934.09	-31933.79	-31934.09	-31934.09	-31933.97	-31934.09	-31934.09
$E_2$	-38313.00	-38313.01	-38313.00	-38313.00	-38312.53	-38313.00	-38313.00
$E_3$	11654.64	11655.95	11654.64	11654.64	11654.80	11654.64	11654.64
$E_4$	34203.95	34202.74	34203.95	34203.95	34203.93	34203.95	34203.96

З даних таблиці для модельної траєкторії (стовпчик “Модельна траєкторія”) видно, що після уточнення початкового наближення значень параметрів (стовпчик “Поч.”) за допомогою градієнтного оптимізаційного алгоритму (стовпчик “Уточ.”) значення параметрів по коефіцієнтах  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$ ,  $C_4$  та енергії активації  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_3$ ,  $E_4$  практично не відрізняються від даних,



опублікованих в літературних джерелах [52, 62]. Це доводить ефективність розробленого в першому розділі дисертації підходу до ідентифікації.

Цікаво також спостерегти, що ідентифіковані значення параметрів для двох виробничих траєкторій (стовпчики “Виробнича траєкторія 1” та “Виробнича траєкторія 2”) мають той самий порядок, що й дані, наведені в літературі [52, 62], особливо після уточнення градієнтним методом (стовпчик “Уточ.”). Це може свідчити про їхню адекватність до фізичної природи явища. На рис. 4.3 наведено результати ідентифікації термокерованої системи по модельній траєкторії. З рисунку видно, що початкове наближення по динаміці неспостережуваної концентрації мікроорганізмів (дрібно-пунктирна крива за лівою віссю ординат) спочатку дуже відрізняється від істинного модельного значення (суцільна крива). Однак після уточнення градієнтним алгоритмом отримується результат (довгий пунктир), що практично не відрізняється від модельних траєкторій (суцільні криві).

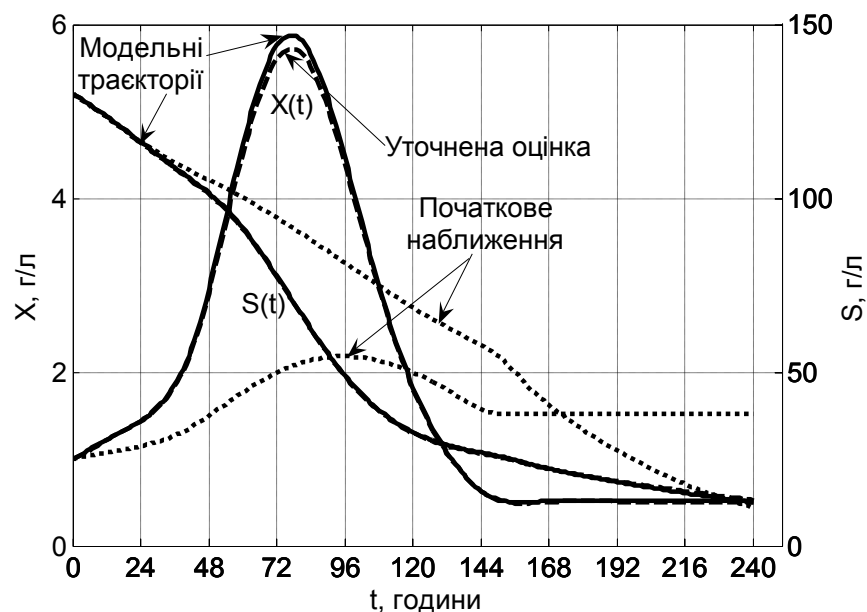


Рис. 4.3. Результат ідентифікації термокерованої системи по модельній траєкторії

Початкове наближення для траєкторії концентрації субстрату (дрібно-пунктирна крива за правою віссю ординат) досить близьке до динаміки модельної траєкторії (суцільна крива), а після уточнення градієнтним методом

ідентифікована траєкторія повністю співпадає з модельною.

Отримані результати підтверджують ефективність запропонованих в параграфах 2.1 та 2.2 методів параметричної ідентифікації моделей ХТС із неспостережуваною змінною стану концентрації мікроорганізмів  $X(t)$  в автономному та термодерованому випадках.

### **4.3. Чисельні експерименти ідентифікації нечітких моделей ХТС в умовах невизначеності**

В даному параграфі наведено результати чисельних експериментів із адаптивною нечіткою моделлю, розробленою в §3.1 та §3.2. Для проведення експериментів використовуються спостереження за реальним технологічним процесом броварної промисловості, які включають 30 його реалізацій при різних температурних режимах. Ця сукупність була розбита на навчальну і контрольну вибірки по 21 та 9 реалізацій, відповідно. На основі ідентифікації траєкторій реалізацій навчальної вибірки відбувалася побудова прогнозного агрегату, що використовується для прогнозування траєкторій контрольної вибірки при різних температурних режимах. В ході процесу прогноз уточнюється в міру нагромадження експериментальних спостережень концентрації субстрату  $S(t)$  нових реалізацій процесу, тоді як траєкторія концентрації мікроорганізмів  $X(t)$  не спостерігається внаслідок обмеженості промислового обладнання.

В ході чисельних експериментів оцінено неусувну невизначеність технологічного процесу, якій відповідає інтервал  $S(t) \in [45,89]$  при температурі  $12^\circ\text{C}$  та початковому рівню субстрату  $S_0 = 90$  на початковій стадії технологічного процесу при  $t \in [0,24]$  години. На основі цього інтервалу для даного обсягу навчальної вибірки встановлено мінімальну потужність прогнозного агрегату  $M(30) = 10$ , де 30 дорівнює кількості спостережених

траєкторій  $N_{traj}$ . Ця потужність відповідає мінімально-допустимій кількості точкових моделей, що моделюють інтервал неусувної невизначеності процесу при прогнозуванні реалізацій як контрольної вибірки так і нових технологічних процесів. Встановлення меншого значення для  $M(30)$  призводить до того, що переважна більшість траєкторій контрольної вибірки виходить за межі прогнозного коридору вже на перших кроках прогнозування.

На рис. 4.4 наведено типовий приклад прогнозування за допомогою агрегату точкових моделей у випадку близького розташування експериментальних даних відносно найвірогіднішої траєкторії агрегату, зірочками позначено траєкторію концентрації субстрату в ході реалізації процесу (Реалізація 1), пунктирними лініями побудовано коридор прогнозування  $[S_{агрег.}^-, S_{агрег.}^+]$  з використанням повної навчальної вибірки  $\Theta_0$ , суцільними лініями показано його уточнення  $[S_{адапт.}^-, S_{адапт.}^+]$ , утворене адаптивною нечіткою моделлю. З рисунку видно, що очікувані значення (середні криві) при використанні  $(S_{адапт.}^{середнє})$  та без використання  $(S_{агрег.}^{середнє})$  алгоритму доволі близькі до траєкторії реалізації, проте адаптивна модель формує точніші наближення найвірогіднішої траєкторії. Верхня та нижня межі нечіткого прогнозування суттєво звужуються алгоритмом в проміжку з 48 по 144 години.

В табл. 4.5 наведено оцінки відносних обсягів інтервалів невизначеності прогнозування з використанням агрегованого прогнозу по повній навчальній вибірці (стрічка “Агрегований” напроти поля “Тип прогнозу”) та після уточнення запропонованим адаптивним алгоритмом (стрічка “Адаптивний”). В табл. 4.6 наведено відношення ширини агрегованого прогнозу до ширини адаптивного прогнозу. Траєкторія, зображена на рис. 4.4 зірочками, відповідає експерименту № 1 в таблицях 4.5 та 4.6.

Розглянемо отримані результати детальніше. Для першої реалізації, яку наведено на рис. 4.4 на початку процесу при  $t=24$  коридор несуттєво звужується на 7 % (див. перший експеримент в табл. 4.6). Суттєвіше звуження відбувається в період  $t \in [48;96]$ , де коридор невизначеності зменшується спочатку на 30 %

при  $t=48$ , а до моменту  $t=96$  коридор звужується майже вдвічі – 19.5 % проти 37.8 % (див. стовпчик  $t=96$  для першого експерименту в табл. 4.5 та 4.6).

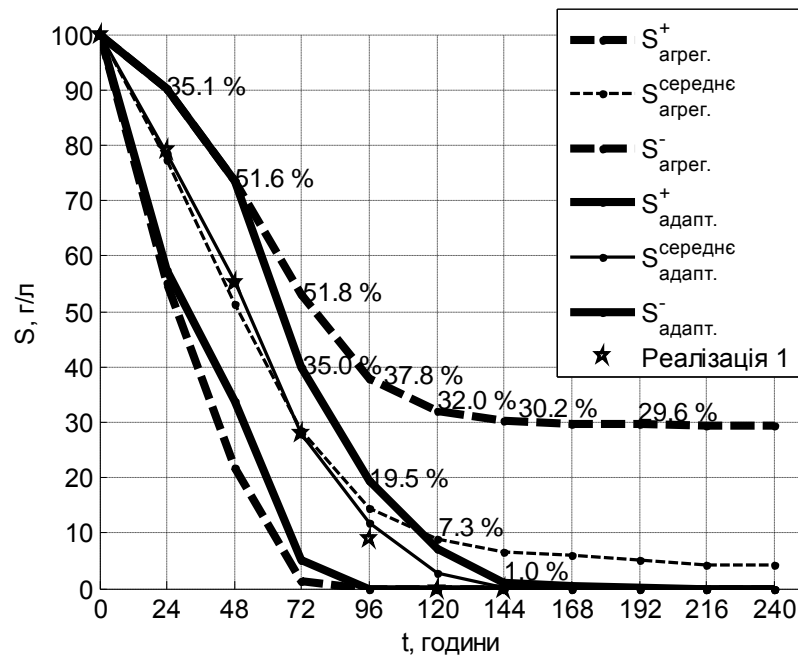


Рис. 4.4. Прогнозування типової реалізації технологічного процесу

В період  $t \in [96;144]$  адаптивний прогноз дає суттєве звуження інтервалу невизначеності відносно агрегатного від 4 разів в час  $t=120$  і остаточно доходить до тридцятикратного звуження при  $t=144$ . Шоста та сьома реалізації контрольної вибірки характеризуються динамікою аналогічною до першої реалізації (див. табл. 4.5 та 4.6).

В другій реалізації з контрольної вибірки спостерігався вихід спостереження за межі прогнозного агрегату, що показано на рис. 4.5 і відповідає нетиповій динаміці виробничого процесу. На період виходу побудовано додаткову оцінку, яка дозволила отримати прогноз, адекватний до цієї нетипової динаміки та зменшити коридор його невизначеності в понад два рази (див. табл. 4.6, реалізація № 2). Після повернення спостережень реалізації в межі агрегатного прогнозу в час  $t=48$  інтервал невизначеності для адаптивної нечіткої моделі збігається з оцінкою агрегатного прогнозу. В час  $t=72$  спостереження суттєво відхилилося від середнього значення по агрегату, що дозволило зменшити інтервал невизначеності на 78 %. Чергове спостереження надійшло лише в час

$t = 144$ , що дозволило звужити інтервал невизначеності до 15.5 % проти 36.2 % для прогнозу без адаптації.

Таблиця 4.5

## Відносні обсяги прогнозних інтервалів

№ експерименту	Тип прогнозу	Часовий інтервал від початку експерименту (години)					
		t=24	t=48	t=72	t=96	t=120	t=144
1	Агрегований	35.1 %	51.6 %	51.8 %	37.8 %	32.0 %	30.2 %
	Адаптивний	32.7 %	39.7 %	35.0 %	19.5 %	7.3 %	1.0 %
2	Агрегований	39.0 %	55.7 %	52.9 %	42.6 %	37.9 %	36.2 %
	Адаптивний	17.5 %	55.7 %	29.7 %	19.3 %	17.5 %	15.5 %
3	Агрегований	36.2 %	52.6 %	51.8 %	33.3 %	23.6 %	18.5 %
	Адаптивний	26.5 %	37.7 %	42.4 %	31.3 %	10.9 %	7.9 %
4	Агрегований	47.3 %	66.4 %	51.5 %	35.7 %	25.5 %	20.8 %
	Адаптивний	8.6 %	24.6 %	34.9 %	35.2 %	25.5 %	4.1 %
5	Агрегований	39.5 %	56.1 %	52.7 %	42.3 %	37.7 %	36.0 %
	Адаптивний	17.7 %	56.1 %	38.1 %	14.1 %	5.1 %	0.1 %
6	Агрегований	39.5 %	56.0 %	49.2 %	30.7 %	22.9 %	18.2 %
	Адаптивний	39.5 %	48.5 %	40.9 %	12.7 %	4.8 %	1.1 %
7	Агрегований	40.4 %	56.8 %	48.8 %	32.0 %	23.5 %	19.9 %
	Адаптивний	40.4 %	56.8 %	17.6 %	15.4 %	8.8 %	4.8 %
8	Агрегований	39.9 %	56.4 %	48.9 %	30.3 %	22.8 %	17.6 %
	Адаптивний	39.9 %	31.4 %	41.6 %	43.6 %	22.4 %	17.5 %

Таблиця 4.6

## Відносне звуження прогнозного інтервалу адаптивною моделлю

№	Часовий інтервал від початку експерименту (години)					
	t=24	t=48	t=72	t=96	t=120	t=144
1	1.07	1.30	1.48	1.94	4.38	30.20
2	2.23	1.00	1.78	2.21	2.17	2.34
3	1.37	1.40	1.22	1.06	2.17	2.34
4	5.50	2.70	1.48	1.01	1.00	5.07
5	2.23	1.00	1.38	3.00	7.39	360.00
6	1.00	1.15	1.20	2.42	4.77	16.55
7	1.00	1.00	2.77	2.08	2.67	4.15
8	1.00	1.80	1.18	0.69	1.02	1.01
max	5.50	2.70	2.77	3.00	7.39	360.00
min	1.00	1.00	1.18	0.69	1.00	1.01

Динаміка третьої реалізації в контрольній вибірці характеризується зменшенням спостережень вниз відносно середніх значень агрегату, що дозволило

зменшити невизначеність адаптивного прогнозу на 37% вже на початку процесу при  $t = 24$  (табл. 4.6). Чергове спостереження в час  $t = 48$  лежить поблизу середнього агрегату, що дозволило і надалі звужувати коридор до 40% відносно прогнозу без адаптації. Проте спостереження в час  $t = 72$  пройшло вище за середнє агрегату, що дещо призупинило процес адаптивного звуження інтервалу невизначеності і коридор зменшився лише на 22% відносно моделі без адаптації. Подальші спостереження процесу в період  $t \in [72, 144]$  дозволяють поступово зменшити інтервал невизначеності від 22% до двох разів відносно моделі без адаптації.

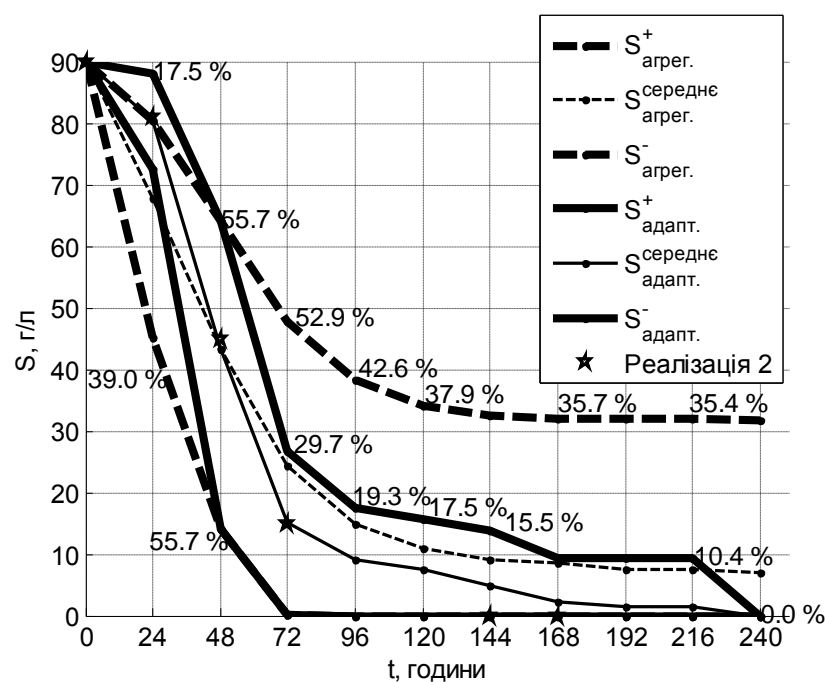


Рис. 4.5. Експеримент № 2 в табл.4.5 та 4.6

Четверта реалізація контрольної вибірки характеризується зміщенням спостережень вгору відносно середніх значень агрегату, що дозволило зменшити невизначеність адаптивного прогнозу до 8.6 % проти 47.3 % для прогнозу без адаптації, тобто коридор невизначеності зменшився в п'ять з половиною разів. Наступна динаміка процесу в період  $t \in [96, 120]$  відбувалася в околі найімовірнішої траєкторії, яка описується середніми значеннями агрегату, причому в проміжку між спостережуваним значенням та середнім агрегату не було знайдено проміжних точкових траєкторій в агрегаті, що не дозволяє зменшити

інтервал невизначеності. В кінці процесу при  $t = 144$  інтервал невизначеності зменшився в п'ять разів відносно прогнозу повного агрегату за рахунок відкидання нереалізованих траєкторій згідно процедури описаної в §3.2.

Динаміка п'ятої реалізації в контрольній вибірці нагадує динаміку другої реалізації, а тому має схожі оцінки абсолютного і відносного звуження інтервалів невизначеності. (див. табл. 4.5 та 4.6).

Динаміка восьмої реалізації в контрольній вибірці (рис. 4.6) має специфічний характер через те, що перше спостереження надійшло лише в час  $t = 48$  і три спостереження в проміжку  $t \in [48, 96]$  виходять за межі прогнозного агрегату. На період цього виходу було побудовано додаткову оцінку, яка в час  $t=96$  характеризується розширенням інтервалу невизначеності до 43.6%, тоді як цей інтервал для повного агрегату складає 30.3%. Проте оцінка з адаптацією включає всі спостережувані точки реалізації на відміну від оцінки без адаптації.

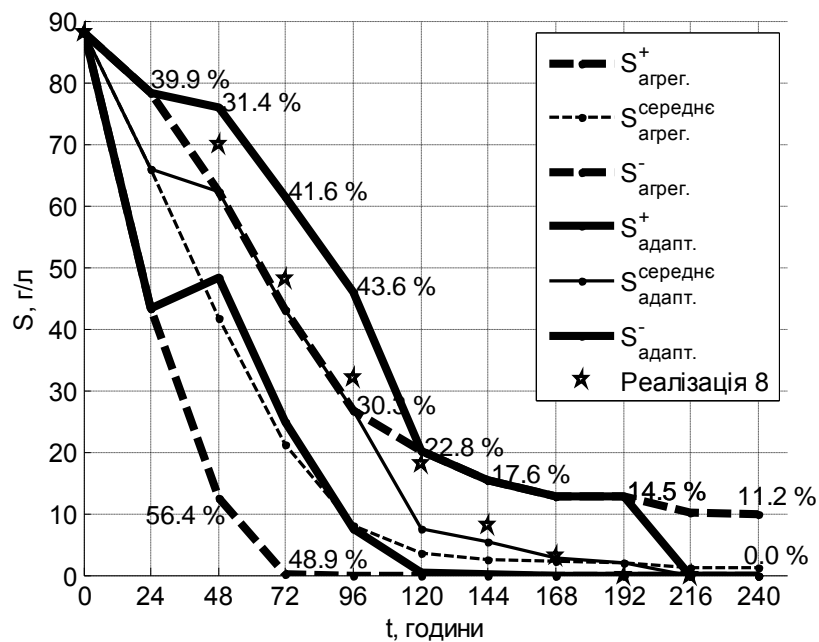


Рис. 4.6. Експеримент № 8 в табл. 4.5 та 4.6

Підсумкові мінімальні та максимальні значення відносних звужень прогнозного інтервалу адаптивною моделлю наведені в двох останніх стрічках табл. 4.6. Вони показують, що на початку процесу невизначеність прогнозу при застосуванні побудованої адаптивної моделі може зменшитися до п'яти з

половиною разів. В період часу  $t \in [48, 96]$  максимальне звуження коридору досягає в середньому 2.82 рази відносно моделі без адаптації. Найсуттєвіше звуження спостерігається в кінці процесу при  $t = 144$  за рахунок відкидання нереалізованих траєкторій агрегату. Ці результати свідчать про ефективність побудованої адаптивної нечіткої моделі при прогнозуванні реалізацій практично важливих виробничих процесів броварної промисловості.

#### **4.4. Експериментальні результати синтезу управління хіміко-технологічним процесом броварного бродіння з мінімальними побічними продуктами**

Для прогнозування реалізацій виробничих процесів запропоновано адаптивну нечітку модель (див. §§ 3.1, 3.2 та [33]). Вона складається з агрегату терموкерованих точкових моделей, які описуються системою звичайних диференціальних рівнянь Моно-Ієрусалимського (2.48). Коли в згаданій моделі замінити систему (2.48) на (4.4), що доповнена рівняннями динаміки концентрації монотонних та немонотонних побічних продуктів броварного бродіння (етилацетату та діацетилу), то за допомогою агрегату можна прогнозувати динаміку цих продуктів у вигляді нечітких оцінок під дією довільних температурних режимів.

Як згадувалося в параграфі 4.1 актуальною задачею покращення якості продукції броварної промисловості виступає пошук таких умов проведення процесів броварного бродіння, які б дозволили мінімізувати концентрації монотонного побічного продукту – етилацетату та немонотонного побічного продукту – діацетилу. В параграфі 3.3 було запропоновано методи розв'язання цієї задачі на основі двох підходів: однокритеріального підходу Белмана-Заде (3.20)–(3.30) та багатокритеріальної дефазифікації (3.31)–(3.43). При цьому результати, одержані з використанням даних підходів порівнювалися з тим, що отримується при використанні одного з поширених емпіричних режимів



проведення технологічного процесу. Це дозволяє оцінити ефект від використання запропонованих математичних моделей при виконанні процесів броварного бродіння. Ефект виміряно як в абсолютних показниках концентрації згаданих побічних продуктів так і в показниках відносного виграшу, що виражається в процентах.

Чисельні результати з використанням однокритеріального підходу Белмана-Заде показують, що пошук вдалого співвідношення значень вагових коефіцієнтів  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \in [0;1]$  в оптимізаційній задачі (3.30) вироджується в окрему оптимізаційну задачу, яка за складністю не поступається першій. Ті комбінації значень ваг, котрі вдалося перевірити, не дозволили одержати хорошого результату, тобто при сортуванні розв'язків по спаданню якості за критерієм (3.30) об'єктивно кращі результати не одержали найвищих оцінок. Натомість найвищі щаблі займали розв'язки, що виграють по одному з критеріїв, суттєво програючи по решті критеріїв.

Використання дефазифікації та багатокритеріального генетичного алгоритму дозволило одержати кращі результати розв'язку задачі моделювання технологічних процесів з мінімальними побічними продуктами. Проте отримання хорошого результату відбулося не одразу. Довелося пройти шлях налаштування генетичного алгоритму та процедури вибору прийняттого розв'язку на Паретовій множині.

Основне налаштування генетичного алгоритму полягає у виборі вдалих методів дефазифікації для кожної з нечітких оцінок основного та побічних продуктів. Перші експерименти було проведено із застосуванням методу дефазифікації за максимумом по функції належності ( $C=1$  в (3.33)) для всіх оцінок як основного  $\hat{P}(\vec{T}, t_{\max})$  так і побічних  $\hat{P}_{BN}(\vec{T}, t_{\max}), \hat{P}_{BM}(\vec{T}, t_{\max})$  продуктів. З одержаних при такому способі результатів можна зробити висновок, що в "найкращих" результатах допускається надто сильне зміщення нижньої межі нечіткої оцінки концентрації основного продукту  $P^-(\vec{T}, t_{\max})$  в сторону недопустимо малих значень. В той же час оцінки побічних продуктів для цих

розв'язків були достатньо прийнятні. Вони виявились несуттєво кращими від емпіричного режиму за оцінкою по максимальному значенню функції належності, проте дещо програючи по верхніх рівнях оцінок побічних продуктів:  $P_{BN}^+(\vec{T}, t_{\max})$  та  $P_{BM}^+(\vec{T}, t_{\max})$ .

Щоб покращити рівень нечіткої оцінки концентрації основного продукту в розв'язках генетичного алгоритму, було випробувано другий ( $C=2$  в (3.33)) метод дефазифікації – за центром ваги (центроїд). Вибір цього методу дефазифікації заснований на тому факті, що його точкова оцінка чутлива до зміни нижньої та верхньої меж функції належності  $P^-(\vec{T}, t_{\max})$  та  $P^+(\vec{T}, t_{\max})$ , тоді як оцінка за максимумом по функції належності ніяк не реагує на цю зміну. Таким чином, зменшення рівня нижньої межі автоматично тягне за собою зменшення дефазифікованої за центром ваги точкової оцінки. Чисельні результати підтвердили висловлені припущення і отримані результати суттєво підняли нижню межу  $P^-(\vec{T}, t_{\max})$ , зменшуючи цим самим ризик зіпсування кінцевого продукту внаслідок недостатнього об'єму основного продукту (етанолу).

Другий недолік дефазифікації по максимуму функції належності, що пов'язаний з програванням по верхніх межах нечітких оцінок концентрації побічних продуктів вдалося подолати за рахунок встановлення для них точкових оцінок, дефазифікованих, власне, по верхній межі, за формулою (3.33) при  $C=3$  для  $\hat{P}_{BN}(\vec{T}, t_{\max})$  та  $\hat{P}_{BM}(\vec{T}, t_{\max})$ .

Для встановлення параметрів обробки популяції генетичного алгоритму використано рекомендації, наведені в [62], а саме ймовірності мутації  $p_{\text{mutation}} = 0.001$ , схрещування  $p_{\text{crossover}} = 0.8$  та кількість точок схрещування  $N_{\text{cros}} = 4$ . Решта параметрів обробки популяції були встановлені резонно до тривалості виконання процедури оцінювання пристосованості, а саме кількість пар нащадків, що утворюються в результаті схрещування дорівнює 5, кількість емігрантів дорівнює 3, кількість особин в початковій популяції  $N_{\text{POP}}|_{t=0}$  дорівнює кількості типових ізотермічних режимів від 8 до 16 °C (9 хромосом)

плюс 5 випадково-згенерованих хромосом (стільки ж, скільки пар нащадків), отже  $N_{POP} = 9 + 5 = 14$   $|_{I=0}$ , гранична кількість поколінь (генерацій)  $I_{MAX} = 25$ .

Налаштування процедури оцінювання пристосованості хромосом-температурних профілів полягає у встановленні ваг  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$  в (3.40). Для їх виявлення проведено серію експериментів. Перший експеримент було проведено при  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = 1$ . Отриманий результат показав, що значення критеріїв інтенсивності продуктів мають близькі значення в межах популяції ( $nf_1^{I_1} = nf_1^{I_2}$ ,  $nf_2^{I_1} = nf_2^{I_2}$ ,  $\forall I_1, I_2$ ) і найменше варіюються від однієї генерації до наступної. Тому навіть незначні коливання їхніх значень зумовлюють суттєві стрибки значень пристосованості, а наслідком цього є виродження популяції до субоптимальної множини розв'язків малої потужності, де не забезпечено оптимальність критеріїв, значення яких характеризуються більшою варіативністю, зокрема бажаної кінцевої інтенсивності основного продукту (3.34). Цей ефект можна розглядати як прояв некоректності в процедурі оцінювання пристосованості. Її було усунуто покладанням вищої ваги на інтенсивність основного продукту  $\alpha_3 = 2$ , при збереженні значень решти ваг незмінними  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_4 = 1$ , що дозволило уникнути небажаних стрибків оцінок пристосованості і отримати множину розв'язків більшої потужності.

Після налаштування генетичний алгоритм згенерував множину Парето-оптимальних розв'язків, що налічує 200 рівноцінних елементів. Для опрацювання даної множини застосовано процедуру вибору прийнятного розв'язку, що описана в параграфі 3.3. Ця процедура полегшує досліднику вибір розв'язку, який найкраще відповідає конкретним умовам, проте ставить перед ним нову проблему – проблему вибору вдалих значень вектора коефіцієнтів відносної важливості критеріїв  $\vec{\beta} = [\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4]$ . Цю проблему вирішено згідно описаного в §3.3 підходу, спочатку покладаючи цей вектор рівним одиничному, а згодом, покомпонентно модифікуючи його, добиваючись щоразу кращого результату за рахунок збільшення ваги бажаного критерію.

Пошук припинявся у випадку, коли наступні збільшення ваги на той чи інший критерій призводили до одночасного програшу по значеннях інших критеріїв.

В таблицях 4.7 та 4.8 порівняно результати при використанні різних значень коефіцієнтів відносної важливості та емпіричного режиму управління. Таблиця 4.7 ілюструє величини відносного виграшу результатів, згенерованих генетичним алгоритмом у порівнянні з емпіричним режимом. Dodatні значення проценту означають покращення у порівнянні з емпіричним режимом проведення процесу. Від'ємні значення означають погіршення по тому чи іншому критерію. Чим більше абсолютне значення проценту тим відповідний розв'язок в більшій мірі виграє чи програє емпіричному режиму. Таблиця 4.7 побудована на основі таблиці 4.8, де вказано абсолютні значення концентрації основного та побічних продуктів при використанні згаданих режимів. Кожна комірка цих таблиць складається з тріади дефазифікованих оцінок відповідного продукту: за нижньою межею по функції належності, за центром ваги та за верхньою межею по функції належності.

Таблиця 4.7

## Покращення значень функцій мети відносно емпіричного режиму

Температурний профіль	$\Delta f_1, \%$	$\Delta f_2, \%$	$\Delta f_3, \%$	$\Delta f_4, \%$	$\sum_{i=1}^4 \Delta f_i, \%$	$k$
$\vec{\beta}^0 = [1.0, 1.0, 1.0, 1.0]$	[0.858; 23.385; 27.853]	[7.298; -5.209; -15.801]	[50.726; 10.366; 0.000]	-24.134	[34.748; 4.407; -12.082]	41
$\vec{\beta} = [1.0, 1.5, 1.0, 1.5]$	[0.208; 4.920; 15.331]	[18.571; 11.077; 2.205]	[13.469; -0.413; 0.000]	-6.408	[25.840; 9.175; 11.129]	57
$\vec{\beta} = [1.0, 1.5, 1.0, 2.3]$	[-1.000; -12.131; -8.728]	[16.037; 16.367; 14.765]	[-52.021; -11.415; 0.000]	24.750	[-12.234; 17.571; 30.787]	140

Функції мети  $f_1$  та  $f_2$  описують концентрації згаданих побічних продуктів броварного бродіння – діацетила та етилацетату, відповідно. Функція мети  $f_3$  характеризує відхилення очікуваного значення інтенсивності основного продукту – концентрації етанолу – від бажаного рівня. Функція мети  $f_4$  описує ширину коридору невизначеності при оцінюванні інтенсивності основного

продукту. В стовпчику “ $\sum_{i=1}^4 \Delta f_i, \%$ ” табл. 4.7 наведено значення узагальнених характеристик виграшу побудованих генетичним алгоритмом режимів відносно емпіричного режиму, що дорівнюють сумі виграшів по всіх функціях мети, причому перше значення тріади дорівнює оптимістичній оцінці, оскільки відповідає “найсприятливішій” можливій реалізації з мінімальними інтенсивностями побічних продуктів і мінімальною різницею з бажаним рівнем основного продукту; друге значення тріади відповідає оцінці максимальної вірогідності, відповідаючи реалізації з найвірогіднішими оцінками інтенсивностей продуктів; третє значення тріади дорівнює оцінці мінімального ризику, оскільки відповідає „найгіршій” можливій реалізації з найбільшою інтенсивністю побічних продуктів. Ця узагальнена характеристика не бере безпосередньої участі в процедурі вибору оптимального розв’язку, але може бути використана як підсумкова характеристика якості побудованого управління. В стовпчику “ $k$ ” табл. 4.7 та 4.8 наведено індекси відповідних розв’язків в Парето-множині, що налічує 200 елементів.

Таблиця 4.8

## Абсолютні значення функцій мети

Температурний профіль	$f_1 = \hat{P}_{BN}$	$f_2 = \hat{P}_{BM}$	$f_3 =  \hat{P} - P^* $	$f_4 = P^+ - P^-$	$\hat{P}$	$k$
Емпіричний	[0.025; 0.064; 0.124]	[3.356; 3.710; 3.955]	[3.869; 8.744; 12.000]	8.131	[46.869; 51.744; 55.000]	–
$\vec{\beta}^0 = [1.0, 1.0, 1.0, 1.0]$	[0.025; 0.049; 0.090]	[3.111; 3.903; 4.579]	[1.906; 7.837; 12.000]	10.094	[44.906; 50.837; 55.000]	41
$\vec{\beta} = [1.0, 1.5, 1.0, 1.5]$	[0.025; 0.061; 0.105]	[2.733; 3.299; 3.867]	[3.348; 8.780; 12.000]	8.652	[46.348; 51.780; 55.000]	57
$\vec{\beta} = [1.0, 1.5, 1.0, 2.3]$	[0.025; 0.072; 0.135]	[2.818; 3.102; 3.371]	[5.881; 9.742; 12.000]	6.119	[48.881; 52.742; 55.000]	140

Видно, що процедура вибору прийняттого розв’язку без встановлення спеціальних значень вектора коефіцієнтів відносної важливості, коли він

дорівнює одиничному вектору  $\vec{\beta} = \vec{\beta}^0 = [1.0, 1.0, 1.0, 1.0]$ , повертає розв'язок, який суттєво покращує показник по функції  $f_1$  до 27.853 % (по верхній межі нечіткої оцінки). Проте він відчутно погіршує показники по функціях  $f_2$  та  $f_4$ . Щоб знайти розв'язок, який би не програвав так явно по значеннях функцій  $f_2$  та  $f_4$ , було встановлено для них вищі показники коефіцієнтів відносної важливості. Це дозволило отримати розв'язок, який виграє порівняно з емпіричним режимом, несуттєво збільшуючи ширину коридору невизначеності до 6.408 %, але покращуючи значення по функціях  $f_1$  та  $f_2$  до 15.331 % та 2.205 % по верхній межі нечіткої оцінки та 4.920 %, 11.077 % по оцінці, дефазифікованій за центром ваги.

Спроба додатково зменшити невизначеність шляхом подальшого збільшення ваги на функцію  $f_4$  призвела до погіршення в оцінці  $f_1$  немонотонного побічного продукту (діацетилу). Тому найприйнятнішим є другий розв'язок ( $k=57$ ), який забезпечує підвищення узагальненої характеристики при мінімальному ризику (при найбільших можливих інтенсивностях побічних продуктів) на 11 %, див. третє значення в стовпчику  $\sum_{i=1}^4 \Delta f_i, \%$  для  $k=57$  (виділено жирним) в табл. 4.7.

На рис. 4.7 показано емпіричний та побудований алгоритмом температурні режими (а), а також трикутні функції належності нечітких множин рівня основного (б), немонотонного – діацетилу (в) та монотонного – етилацетату (г) побічних продуктів. Вертикальними лініями наведено дефазифіковані за методом центру ваги (3.33) рівні концентрацій основного (б) та двох побічних (в), (г) продуктів, тобто їх очікувані оцінки. Видно співпадіння очікуваних рівнів основного продукту для емпіричного та оптимізованого режимів (б). По рівню немонотонного побічного продукту – діацетилу – помітне зменшення верхньої межі стосовно емпіричного режиму. По рівню монотонного побічного продукту – етилацетату – спостерігається зсув функції належності вліво, що відповідає суттєвому зменшенню очікуваної концентрації по даному побічному продукту в порівнянні з емпіричним режимом управління.

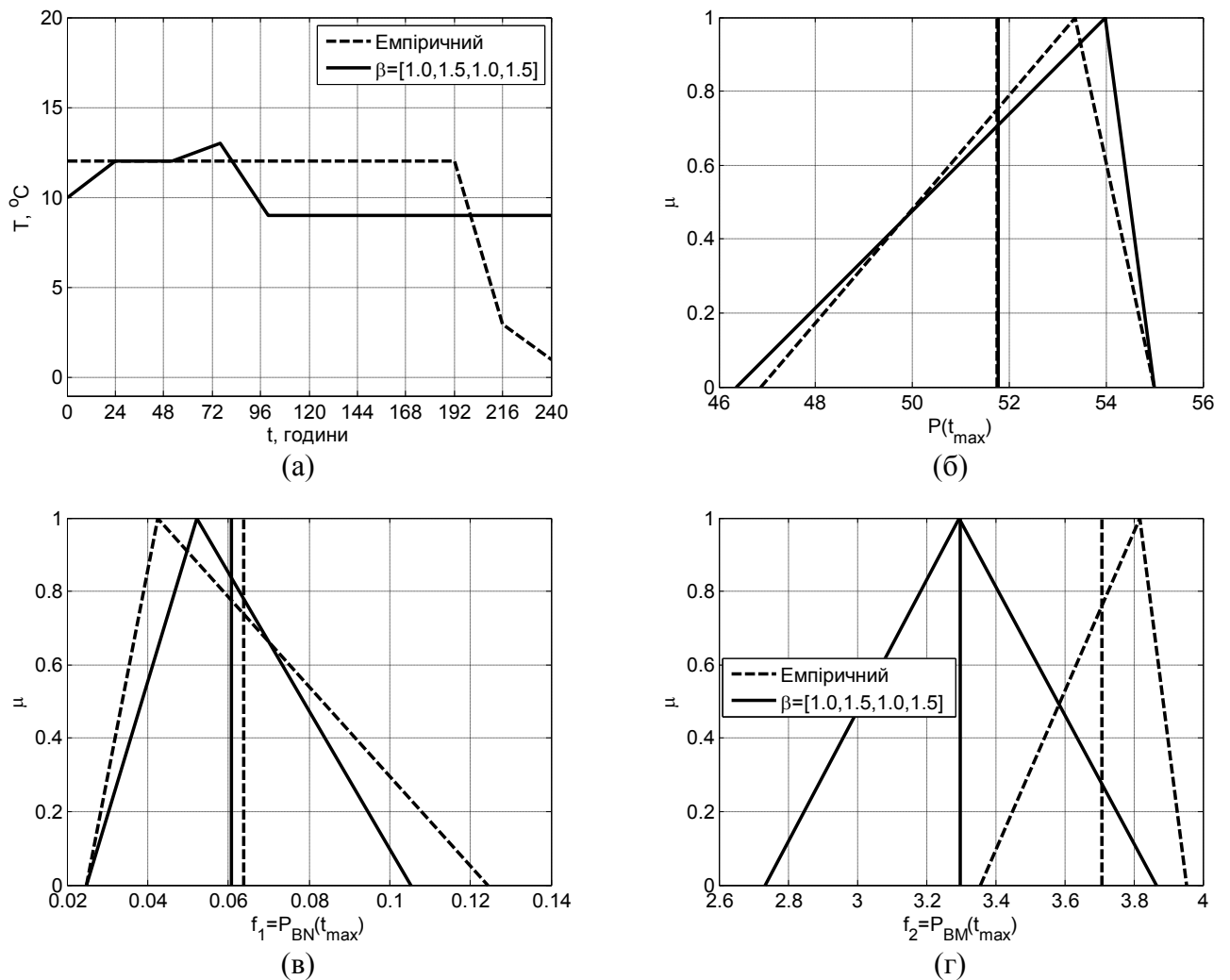


Рис. 4.7. Порівняння характеристик процесу при використанні емпіричного та побудованого генетичним алгоритмом режимів управління

Таким чином використання запропонованого методу моделювання процесу з мінімальними побічними продуктами дозволило суттєво знизити рівень побічних впливів і забезпечити бажаний рівень основного продукту в технологічних процесах броварного бродіння.

#### 4.5. Висновки четвертого розділу

1. Розглянуто сфери застосування розроблених моделей нечітких процесів в системах Моно-Іерусалимського при виконанні технологічних процесів броварного та виноробного бродіння.

2. Наведено результати параметричної ідентифікації точкових систем Моно-Ієрусалимського з неспостережуваною змінною стану у автономному та термокерованому випадках, які показали, що запропоновані методи досягають збіжності до істинного розв'язку при ідентифікації як модельних так і виробничих траєкторій. Порядок значень параметрів, ідентифікованих по виробничих траєкторіях, збігається з даними, наведеними в літературі, що свідчить про їх адекватність до фізичної природи явища.

3. Чисельні результати прогнозування періодичних процесів броварного бродіння з використанням адаптивної нечіткої моделі систем Моно-Ієрусалимського, показали, що дана модель дозволяє звузити підсумкові прогнозні інтервали до п'яти з половиною разів відносно моделі без адаптації на початку процесу, при  $t \in [0, 48]$ . В період часу  $t \in [48, 96]$  звуження коридору сягає в середньому 2.82 разів. А найсуттєвіше звуження спостерігається в кінці процесу при  $t = 144$  за рахунок відкидання нереалізованих траєкторій агрегату.

4. Отримано чисельні результати синтезу управління ХТП броварного бродіння з мінімальними концентраціями побічних продуктів. Їх аналіз дозволив виявити оптимальні температурні умови проведення процесів при яких зменшується концентрації немонотонного побічного продукту броварного бродіння (діацетилу) на 4.9 % та монотонного побічного продукту (етилацетату) на 11.0 % при досягненні необхідного рівня основного продукту броварного бродіння (етанолу) в 51.8 г/л. Такий результат дозволяє покращити якість кінцевих виробів броварної промисловості.



## ВИСНОВКИ

В дисертаційній роботі розв'язана актуальна наукова задача математичного моделювання динаміки технологічних процесів в хіміко-технологічних системах Моно-Ієрусалимського з врахуванням впливу невизначеності на параметри їхнього стану. При цьому отримано такі наукові та практичні результати:

1. Розроблено методи параметричної ідентифікації точкових моделей частково спостережуваних автономних систем, що дозволили досягти збіжності процедури ідентифікації до істинного розв'язку для всієї сукупності аналізованих модельних та виробничих траєкторій, а також розробити стійкий метод структурної ідентифікації моделей систем з керованим зворотнім зв'язком.

2. Розроблено метод параметричної ідентифікації сімейства моделей термокерованих систем з неспостережуваною змінною стану концентрації мікроорганізмів на основі результатів ідентифікації їхніх автономних аналогів. Цей метод збігається до істинного розв'язку на модельних задачах, а порядок значень параметрів, ідентифікованих по виробничих траєкторіях, збігається з даними, наведеними в літературі, що свідчить про їхню адекватність до фізичної природи явища.

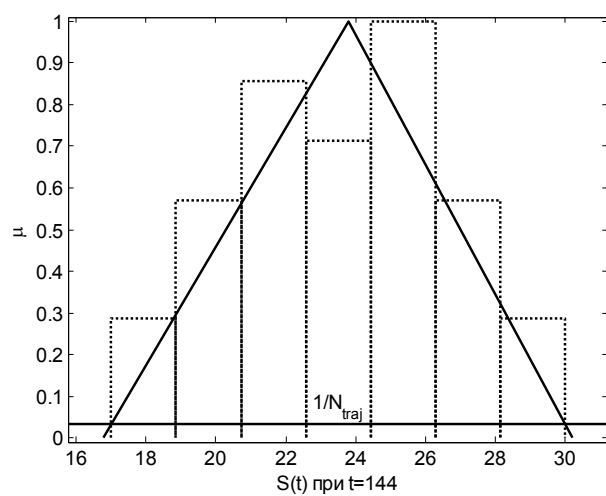
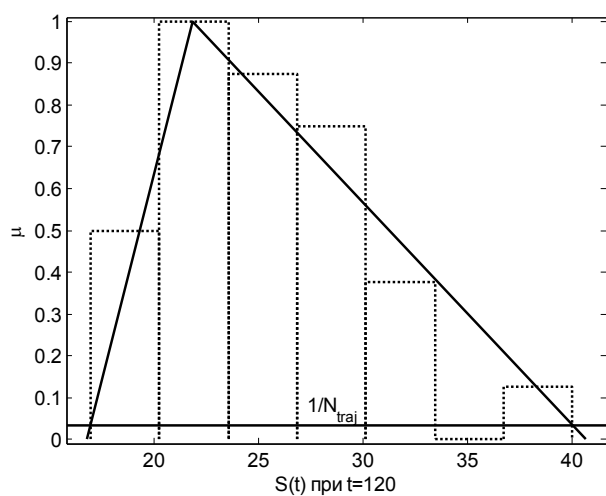
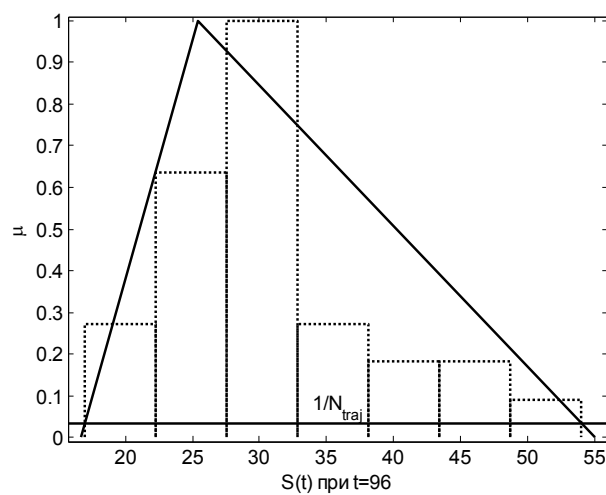
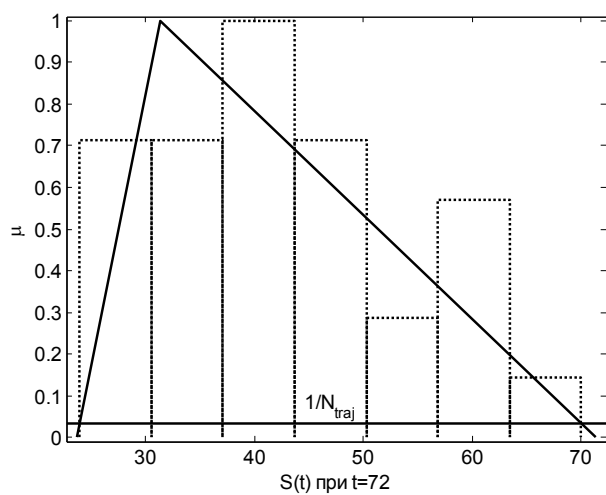
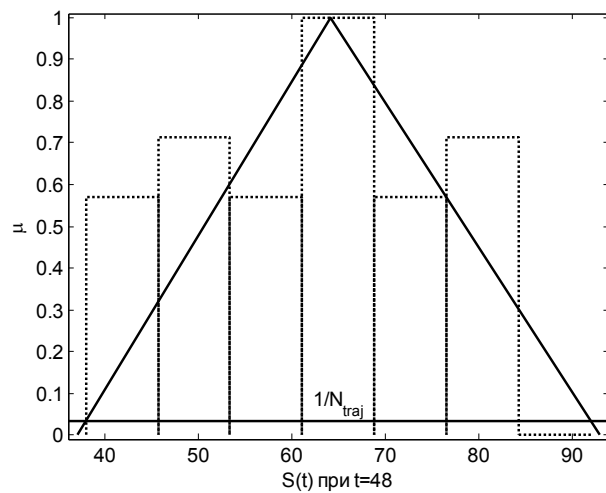
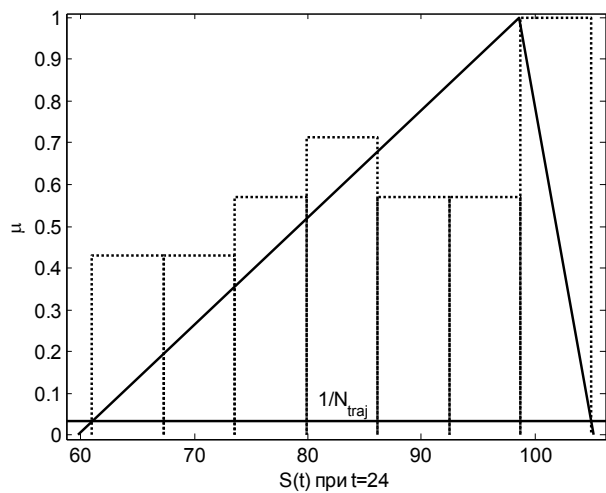
3. Розроблено адаптивну модель нечітких процесів в термокерованих хіміко-технологічних системах, що дозволяє звузити прогностні інтервали на початку процесу в середньому до п'яти з половиною разів відносно моделі без адаптації при прогнозуванні динаміки технологічних процесів броварного бродіння.

4. Розроблено метод управління хіміко-технологічним процесом з мінімальними інтенсивностями побічних продуктів при забезпеченні бажаної інтенсивності основного продукту. Метод побудовано на основі вищезгаданої адаптивної моделі та генетичного алгоритму і на відміну від існуючих, він враховує невизначеності оцінок як основного, так і побічних продуктів.

5. Розроблено метод нормування множини Парето-оптимальних розв'язків вищезгаданої задачі управління, який враховує як об'єктивні особливості розхилу значень критеріїв задачі, так і задані користувачем відносні пріоритети. Його використання дозволило знайти оптимальні умови проведення технологічного процесу броварного бродіння, що забезпечує зменшення концентрації немонотонного побічного продукту (діацетилу) на 4.9 %, а монотонного (етилацетату) на 11.0 %.

## ДОДАТОК А

Форми функцій належності, побудовані по спостереженій множині 30  
виробничих траєкторій



## ДОДАТОК Б

Алгоритм прогнозування динаміки траєкторій, що виходять за межі  
прогнозного коридору

Алгоритм  $\Theta_{k-1} \leftarrow \text{TestOutside}(\Theta_{k-1}, S_{real}(t_k))$ :

TestOutside.1. **Якщо** експериментальне спостереження знаходиться в межах прогнозного коридору:  $S^-(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k) \leq S_{real}(t_k) \leq S^+(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k)$ , то перейти на крок TestOutside.2.

**Інакше** перейти на крок TestOutside.4.

TestOutside.2. **Якщо**  $bool\_outside = true$ , то відновлюємо адаптивну модель останнього дискрета, що передував виходу:  $\Theta_{k-1} \leftarrow \Theta'$ ; позначаємо, що спостереження повернулися в межі прогнозного коридору:  $bool\_outside \leftarrow false$ .

TestOutside.3. **Вихід** з алгоритму.

TestOutside.4. Позначаємо, що спостереження виходить за межі прогнозного коридору:  $bool\_outside \leftarrow true$ ; сортуємо точкові траєкторії по зростанню відносно їхнього прогнозу в час  $t_k$ :  $\theta \leftarrow \text{sort}[\Theta_{k-1}, t_k]$ .

TestOutside.5. Запам'ятовуємо адаптивну модель останнього дискрета, що передувє виходу:  $\Theta' \leftarrow \Theta_{k-1}$ .

TestOutside.6. **Якщо** відбувся вихід за нижню межу:  $S_{real}(t_k) < S^-(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k)$ , то

TestOutside.6.1. Формуємо додаткову оцінку на період виходу, котра складається з множини  $M$  ближніх до найнижчої траєкторії агрегату:  $\Theta_{k-1} \leftarrow \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_M\}$ , де  $\theta \equiv \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n\}$  – сортована навчальна вибірка індексів точкових траєкторій.

TestOutside.6.2. Присвоюємо середньому прогнозу значення нижньої межі:  $\bar{S}(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k) \leftarrow S^-(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k)$ .

TestOutside.6.3. Проектуємо нову нижню межу симетрично до верхньої:  $S^-(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k) \leftarrow 2\bar{S}(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k) - S^+(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k)$ .

TestOutside.7. **Інакше** відбувся вихід за верхню межу:  $S_{real}(t_k) > S^+(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k)$ :

TestOutside.7.1. формуємо додаткову оцінку на період виходу, котра складається з множини  $M$  ближніх до найвищої траєкторії агрегату:  $\Theta_{k-1} \leftarrow \{\theta_{n-M+1}, \theta_{n-M+2}, \dots, \theta_n\}$ , де  $\Theta \equiv \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n\}$ .

TestOutside.7.2. Присвоюємо середньому прогнозу значення верхньої межі:  $\bar{S}(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k) \leftarrow S^+(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k)$ .

TestOutside.7.3. Проектуємо нову верхню межу симетрично до нижньої:  $S^+(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k) \leftarrow 2\bar{S}(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k) - S^-(\Theta_{k-1}, \vec{T}, t_k)$ .

TestOutside.8. **Кінець.**

## ДОДАТОК В

### Графічний інтерфейс користувача для модуля параметричної ідентифікації точкових моделей ХТС

FSM\_DB
\_ \_ X

#### Ідентифікація точкових моделей

Траєкторія   Теоретична траєкторія

Набір параметрів

Початкове наближення 
 Уточнені параметри 
 табулювати

Левенберг-Маркварт 
 Кільк.вickl.ЦФ 
 Знач.ЦФ

Показати X  Показати S  Показати DY
 

 Проста легенда

alpha  Ідент. всі 
 dS  Ч/Б

Параметри моделі сімейства Моно-Іерусалимського

<input checked="" type="checkbox"/> Автоматична настройка <input checked="" type="checkbox"/> A1 <input type="text" value="0.017652"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input checked="" type="checkbox"/> A2 <input type="text" value="0.009611"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input checked="" type="checkbox"/> A3 <input type="text" value="0.11066"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input checked="" type="checkbox"/> A4 <input type="text" value="1.1226"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input checked="" type="checkbox"/> A5 <input type="text" value="43.5093"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="checkbox"/> A6 <input type="text" value="1"/> <input type="text"/> <input type="text"/>	<input type="text" value="Моно-Торо"/> <input checked="" type="checkbox"/> Якобі X0= <input type="text" value="4"/> k= <input type="text" value="0.01"/> X*= <input type="text" value="9"/> <input type="button" value="Обчисл.поч.наближ."/> <input type="text" value="12"/> °C <input type="button" value="Андре-Торо"/> Макс.кільк.ітерацій <input type="text" value="20"/> Точн. <input type="text" value="0.001"/> alpha= <input type="text" value="1"/> <input type="text" value="Левенберг-Маркварт"/> <input type="checkbox"/> 3 етапи <input type="button" value="Уточнення параметрів"/> <input type="button" value="Графік збіжності"/>
---	---

Батьківські набори параметрів

```

-----
2031. Поч.наближ. при k=0.01,x0=4,x*=9, Поч.наближ.
2035. Уточ.2031,sn=1 2 3 4 5 , X*=9, \alpha=10, Левенберг-Маркварт
-----

```

## ДОДАТОК Д

**Вплив регуляризуючого параметра  $\alpha$  в процедурі параметричної  
ідентифікації точкових моделей ХТС з неспостережуваною змінною стану  
концентрації мікроорганізмів**

Виробнича траєкторія	$\alpha$	$X_{\max.\text{err.}}$	$S_{\max.\text{err.}}$	$S_{\text{std.err.}}$	$A_1$	$A_2$	$A_3$	$A_4$	$A_5$
1. СКТ1	0.01	1.609	2.180	1.220	0.033	0.033	0.158	1.097	55.000
	0.10	1.400	2.057	1.233	0.033	0.033	0.153	1.097	55.000
	1.00	0.025	2.507	1.318	0.038	0.037	0.129	1.097	55.000
	10.00	0.000	2.526	1.316	0.038	0.037	0.128	1.098	54.999
	100.00	0.000	2.578	1.329	0.038	0.037	0.128	1.096	55.000
	1000.00	0.036	13.466	6.817	0.047	0.053	0.117	1.098	55.000
2. СКТ1_1	0.01	3.940	1.920	0.416	0.027	0.021	0.578	1.000	50.000
	0.10	4.051	2.229	0.953	0.027	0.021	0.578	1.004	49.999
	1.00	0.180	7.443	1.927	0.055	0.045	0.254	0.000	49.838
	10.00	0.001	7.595	1.977	0.056	0.045	0.247	0.000	49.844
	100.00	0.000	7.575	1.998	0.056	0.045	0.248	0.128	49.879
	1000.00	0.000	13.382	6.133	0.066	0.060	0.241	1.000	50.000
3. СКТ2	0.01	8.899	1.866	0.948	0.028	0.013	0.086	15.373	44.772
	0.10	1.168	4.000	1.116	0.018	0.008	0.102	0.893	43.502
	1.00	0.021	4.000	1.335	0.013	0.004	0.109	0.000	43.540
	10.00	0.001	4.000	1.332	0.012	0.003	0.113	0.887	43.501
	100.00	0.000	4.000	1.288	0.017	0.009	0.111	0.874	43.500
	1000.00	0.000	4.000	1.312	0.017	0.009	0.111	0.874	43.500
4. СКТ2_2	0.01	1.420	0.121	0.053	0.047	0.036	0.276	0.000	43.431
	0.10	1.053	0.311	0.122	0.049	0.038	0.259	0.001	43.370
	1.00	0.018	0.900	0.269	0.055	0.043	0.223	0.000	43.382
	10.00	0.000	0.912	0.272	0.055	0.043	0.223	0.000	43.364
	100.00	0.000	0.899	0.270	0.055	0.043	0.223	0.065	43.375
	1000.00	0.000	3.099	1.242	0.057	0.045	0.223	0.870	43.500
5. СКТ2_3	0.01	3.748	3.000	0.822	0.013	0.001	0.649	1.004	50.000
	0.10	3.301	2.411	1.080	0.033	0.024	0.524	1.449	50.012
	1.00	0.106	6.283	1.325	0.033	0.031	0.294	4.525	32.265
	10.00	0.001	6.530	1.337	0.050	0.041	0.279	1.551	44.502
	100.00	0.000	6.542	1.336	0.051	0.041	0.278	1.467	45.500
	1000.00	0.000	6.583	1.329	0.057	0.044	0.277	1.032	49.919
6. СКТ3	0.01	5.000	1.906	0.791	0.000	0.017	1.627	0.875	44.499
	0.10	5.000	1.701	0.892	0.002	0.018	1.564	0.867	44.498
	1.00	0.284	15.254	4.918	0.073	0.061	0.283	0.889	44.500
	10.00	0.004	15.325	5.166	0.075	0.063	0.274	0.890	44.500
	100.00	0.000	15.228	5.216	0.075	0.064	0.274	0.890	44.500
	1000.00	0.001	44.222	25.658	0.117	0.149	0.157	0.891	44.500
7. СКТ3_2	0.01	7.141	0.731	0.435	0.098	0.078	0.160	0.019	44.468
	0.10	1.281	6.000	1.299	0.039	0.008	0.322	0.884	44.500
	1.00	0.047	3.347	0.984	0.077	0.044	0.354	7.410	54.352
	10.00	0.003	3.565	1.014	0.071	0.051	0.325	3.560	45.342
	100.00	0.000	3.670	0.992	0.074	0.057	0.313	1.752	44.675
	1000.00	0.000	10.213	2.349	0.046	0.024	0.299	0.889	44.500
8. СКТ3_3	0.01	7.992	0.988	0.473	0.077	0.061	0.123	0.004	44.938
	0.10	3.065	2.747	0.627	0.066	0.049	0.175	0.000	45.324
	1.00	0.081	4.125	0.946	0.051	0.035	0.244	0.000	45.156

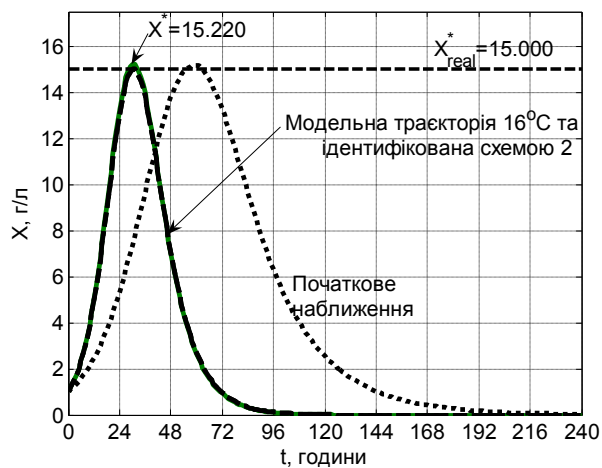
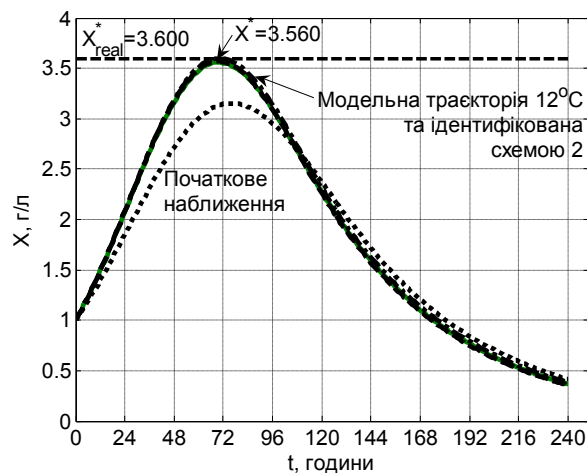
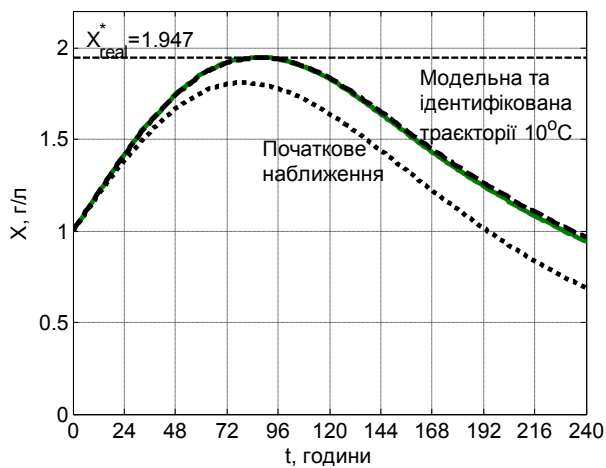
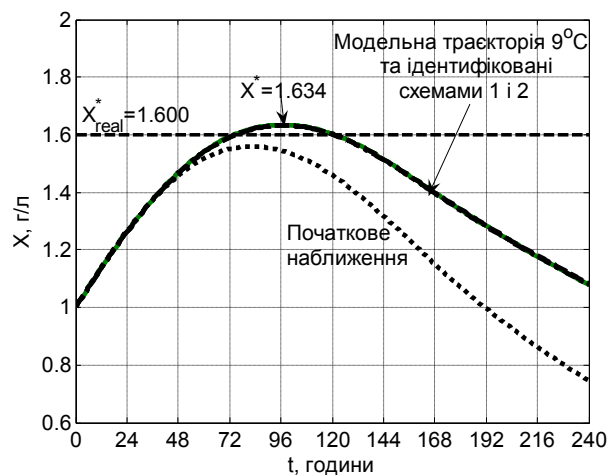
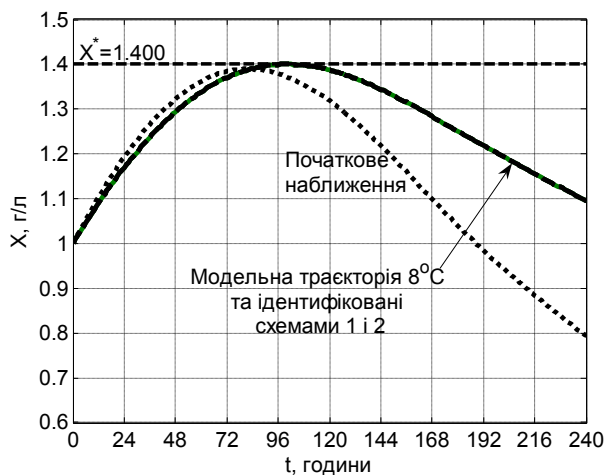
Виробнича траєкторія	$\alpha$	$X_{\max.\text{err.}}$	$S_{\max.\text{err.}}$	$S_{\text{std.err.}}$	$A_1$	$A_2$	$A_3$	$A_4$	$A_5$
	10.00	0.001	4.204	0.961	0.049	0.033	0.252	0.811	45.017
	100.00	0.000	4.214	0.958	0.049	0.033	0.252	0.893	45.004
	1000.00	0.000	4.402	1.009	0.053	0.038	0.249	0.903	45.002
9. СКТ3_4	0.01	4.990	2.699	1.347	0.010	0.018	1.005	2.627	55.446
	0.10	4.987	2.722	1.341	0.010	0.017	1.018	4.537	56.164
	1.00	0.294	11.530	3.680	0.038	0.051	0.306	26.570	34.050
	10.00	0.002	11.966	3.901	0.045	0.055	0.283	21.568	39.354
	100.00	0.000	12.572	4.279	0.067	0.068	0.231	3.150	53.726
	1000.00	0.000	14.405	4.325	0.062	0.062	0.207	1.101	55.000
10. СКТ4	0.01	3.940	0.364	0.198	0.025	0.019	0.514	3.201	43.634
	0.10	2.874	1.024	0.355	0.039	0.032	0.355	0.802	43.491
	1.00	0.047	2.548	0.969	0.053	0.042	0.213	0.861	43.499
	10.00	0.001	2.381	0.796	0.055	0.044	0.208	0.001	43.407
	100.00	0.000	2.350	0.872	0.055	0.044	0.209	0.106	43.424
	1000.00	0.000	4.550	2.632	0.058	0.048	0.209	0.870	43.500
11. СКТ4_2	0.01	0.666	2.133	1.024	0.067	0.064	0.275	1.104	55.000
	0.10	0.671	1.997	1.048	0.067	0.064	0.274	1.104	55.000
	1.00	0.019	2.199	1.011	0.043	0.059	0.247	0.806	34.455
	10.00	0.000	2.684	1.039	0.069	0.067	0.252	1.272	54.438
	100.00	0.001	25.078	10.840	0.151	0.160	0.423	1.116	55.001
	1000.00	0.000	42.111	24.390	0.249	0.334	0.319	1.114	55.000
12. СКТ4_3	0.01	8.885	21.000	4.577	0.143	0.096	0.257	0.860	43.000
	0.10	5.000	2.865	1.212	0.000	0.029	2.613	0.768	42.989
	1.00	0.111	11.985	4.098	0.131	0.112	0.474	0.855	42.995
	10.00	0.001	12.115	4.065	0.132	0.115	0.459	0.000	42.473
	100.00	0.000	12.045	4.107	0.132	0.112	0.464	0.687	42.871
	1000.00	0.001	14.463	8.547	0.140	0.131	0.398	0.859	43.000
13. СКТ5	0.01	5.000	2.895	1.146	0.008	0.020	1.482	0.939	48.498
	0.10	5.000	2.944	1.085	0.010	0.022	1.432	0.015	48.571
	1.00	0.271	13.605	4.529	0.070	0.062	0.293	0.000	46.910
	10.00	0.002	13.850	4.549	0.072	0.063	0.283	0.053	47.527
	100.00	0.000	14.209	8.100	0.102	0.094	0.340	0.970	48.500
	1000.00	0.002	38.870	21.485	0.150	0.174	0.286	0.970	48.500
14. СКТ6	0.01	3.527	1.286	0.427	0.026	0.020	0.356	0.000	41.466
	0.10	3.125	1.724	0.514	0.030	0.023	0.318	0.000	41.447
	1.00	0.069	3.356	1.412	0.046	0.036	0.180	0.000	41.411
	10.00	0.001	3.385	1.428	0.047	0.037	0.178	0.000	41.396
	100.00	0.000	3.383	1.431	0.047	0.037	0.178	0.009	41.395
	1000.00	0.000	3.761	1.993	0.050	0.040	0.184	0.826	41.500
15. СКТ6_2	0.01	5.000	3.470	1.512	0.003	0.030	2.611	1.081	54.994
	0.10	5.000	3.342	1.525	0.001	0.028	2.681	1.082	54.993
	1.00	0.183	10.969	3.907	0.049	0.085	0.637	31.968	22.410
	10.00	0.046	26.617	12.569	0.963	1.029	2.533	1.077	55.031
	100.00	0.085	54.593	32.949	1.527	2.236	1.266	1.104	54.997
	1000.00	0.000	50.957	29.964	9.453	13.317	5.112	1.173	54.979
16. СКТ6_3	0.01	1.833	3.807	1.782	0.064	0.050	0.190	0.889	44.500
	0.10	1.539	3.981	1.572	0.064	0.052	0.192	0.000	44.442
	1.00	0.045	4.910	1.492	0.059	0.048	0.229	0.000	44.475
	10.00	0.001	4.926	1.494	0.059	0.048	0.231	0.000	44.477
	100.00	0.000	4.929	1.504	0.059	0.047	0.231	0.043	44.480
	1000.00	0.000	4.901	1.658	0.057	0.045	0.235	0.887	44.500
17. СКТ6_4	0.01	0.436	0.149	0.080	0.065	0.055	0.267	0.889	44.500
	0.10	0.317	0.152	0.079	0.066	0.056	0.261	0.488	44.416



Виробнича траєкторія	$\alpha$	$X_{\max.\text{err.}}$	$S_{\max.\text{err.}}$	$S_{\text{std.err.}}$	$A_1$	$A_2$	$A_3$	$A_4$	$A_5$
	1.00	0.003	0.170	0.085	0.068	0.057	0.248	0.002	44.323
	10.00	0.000	0.177	0.086	0.068	0.057	0.248	0.093	44.344
	100.00	0.000	0.170	0.087	0.068	0.057	0.248	0.035	44.333
	1000.00	0.000	0.562	0.213	0.066	0.055	0.250	0.890	44.500
18. СКТ6_5	0.01	3.156	2.972	1.354	0.048	0.039	0.473	0.839	42.499
	0.10	3.894	2.200	1.214	0.037	0.031	0.594	0.809	42.498
	1.00	0.071	4.022	1.673	0.068	0.055	0.257	0.000	42.436
	10.00	0.001	4.168	1.888	0.067	0.053	0.259	0.851	42.500
	100.00	0.000	4.182	1.886	0.067	0.053	0.259	0.851	42.500
	1000.00	0.002	31.720	18.809	0.109	0.124	0.202	0.851	42.500
19. СКТ7	0.01	5.000	2.046	0.914	0.000	0.014	1.815	0.965	48.998
	0.10	5.000	2.043	0.988	0.005	0.017	1.697	0.967	48.998
	1.00	0.521	13.497	4.985	0.080	0.069	0.362	0.000	48.208
	10.00	0.005	13.657	5.196	0.085	0.072	0.341	0.963	48.983
	100.00	0.009	15.806	7.397	0.120	0.111	0.390	0.981	49.003
	1000.00	0.067	76.020	44.530	0.507	0.821	0.184	0.981	49.017
20. СКТ7_2	0.01	4.591	1.280	0.662	0.048	0.049	1.316	0.870	44.996
	0.10	4.591	1.066	0.688	0.047	0.048	1.313	0.862	44.995
	1.00	0.156	6.371	2.763	0.115	0.098	0.437	0.000	44.711
	10.00	0.002	6.458	2.771	0.116	0.099	0.429	0.000	44.708
	100.00	0.012	14.040	5.773	0.133	0.123	0.402	0.902	45.000
	1000.00	0.002	55.904	32.586	0.292	0.412	0.242	0.906	44.999
21. СКТ7_3	0.01	4.282	1.620	0.619	0.008	0.001	0.607	0.878	44.000
	0.10	4.277	1.591	0.613	0.008	0.001	0.607	0.854	43.999
	1.00	0.080	4.557	1.749	0.047	0.034	0.220	0.887	43.999
	10.00	0.001	4.498	1.701	0.048	0.036	0.213	0.000	43.890
	100.00	0.000	4.442	1.720	0.049	0.036	0.213	0.000	43.894
	1000.00	0.000	13.329	6.923	0.066	0.061	0.208	0.880	44.000
22. СКТ7_4	0.01	5.000	2.698	0.758	0.000	0.020	1.982	0.756	40.996
	0.10	5.000	2.414	0.781	0.000	0.021	2.039	0.751	40.995
	1.00	0.247	11.228	4.807	0.107	0.092	0.378	0.000	40.677
	10.00	0.066	52.181	34.586	3.866	5.655	2.039	0.874	40.981
	100.00	0.007	53.713	35.171	4.900	7.144	3.100	0.871	41.017
	1000.00	0.001	53.709	35.168	4.888	7.127	3.094	0.871	41.017
23. СКТ8	0.01	3.928	1.574	0.600	0.030	0.025	0.536	0.864	43.499
	0.10	3.929	1.780	0.539	0.030	0.025	0.533	0.858	43.498
	1.00	0.074	3.473	1.336	0.060	0.049	0.230	0.000	43.398
	10.00	0.001	3.501	1.349	0.060	0.049	0.227	0.000	43.387
	100.00	0.000	3.582	1.487	0.059	0.047	0.230	0.671	43.477
	1000.00	0.001	16.582	8.353	0.078	0.075	0.220	0.870	43.500
24. СКТ8_2	0.01	4.696	1.269	0.629	0.029	0.033	0.923	3.590	58.662
	0.10	4.604	1.180	0.688	0.032	0.036	0.833	1.114	54.999
	1.00	0.254	8.611	3.048	0.059	0.066	0.329	16.053	43.960
	10.00	0.009	9.389	3.316	0.080	0.080	0.269	1.124	55.001
	100.00	0.000	9.315	3.362	0.081	0.080	0.269	1.124	55.001
	1000.00	0.002	27.801	12.718	0.119	0.144	0.233	1.105	55.000
25. СКТ8_3	0.01	0.947	2.026	0.590	0.034	0.028	0.163	0.002	43.958
	0.10	0.611	2.137	0.602	0.035	0.028	0.155	0.000	43.939
	1.00	0.010	2.370	0.657	0.037	0.030	0.142	0.000	43.927
	10.00	0.001	2.356	0.663	0.037	0.030	0.142	0.000	43.938
	100.00	0.000	2.409	0.706	0.036	0.029	0.143	0.260	43.956
	1000.00	0.001	2.354	1.114	0.037	0.029	0.144	0.880	44.000

## ДОДАТОК Е

### Результати модельних задач параметричної ідентифікації автономних ХТС



## ДОДАТОК Ж

### Лістинг модуля адаптивного прогнозування нечітких процесів в ХТС Моно-Ієрусалимського

Основна процедура прогнозування, в якій завантажуються параметри агрегату точкових траєкторій, задається їх навчальна та контрольна вибірки:

```
function LTTCP_fuzzy_modelling_and_control
clc
% Прапорець пошуку температурного управління:
bool_optimization = 0;

Whole_proc_Time = 240; % Пошук таких умов проведення процесу,
% щоб концентрація побічних продуктів в час Whole_proc_Time годин
% була мінімальною.

% Коли цей прапорець дорівнює логічній одиниці,
% то програма генерує температурні профілі,
% які повинні мінімізувати вміст шкідливих
% домішок і забезпечувати бажаний рівень
% основного продукту.

% Значення, яке визначає по якій траєкторії
% буде проводитися пошук температурного управління:
% 0 -- по одній з промислових з перевіркою вибірки
% 1 -- по середній модельній траєкторії,
% 2 -- по песимістичній модельній траєкторії,
% 3 -- по оптимістичній модельній траєкторії.
control_by = 0;

global APF A C E X0 DM dts bw FontSize
bw = 1; % bw - булева змінна, що визначає монохромність зображень
FontSize = 12; d = 0;

% Drawing mode 0 -- none,
%                1 -- roof functions,
%                2 -- trace trajectories,
%                3 -- trace agregate corridors,
%                4 -- only whole agregate corridors,
%                5 -- graphics of trajectories for identification
%                   of fuzzy parameter values,
%                6 -- only agregate trajectories for identification
%                   of fuzzy parameter values,
DM = 4; %4

bool_movie = 0;

% Відобразити оцінки ширини коридору невизначеності в процентах:
bool_uncertainty_percents = 0;

% Рисувати точкові траєкторії:
bool_disp_point_traj = 0;

% Testing set will contain all unsuccessfully identified trajectories.
T_S = [
      2 8 13 14 16 17 23 25
];
```

```

% X0 -- initial microorganisms concentration
X0 = 1;

% Distinguish experimental base to
% learning and testing sets.
L_S_WHOLE = [
    1 3:7 9:12 15 18:22 24 26:29
];

MOVIE_FRAME_INDEX = 1;

N_days = 10;
dts = (0:N_days)*24;
% Load experimental measurements from base
% [SM, N_Ex, TM, Suitable_Ex_Names] = GetAllMeasurementMatrix (N_days, false,
true); % N_Ex - number of trajectories

% Load identified parameter values for thermal-controlled case:
load Contr_all_impr

Show_A_Set(L_S_WHOLE, 'learning', Suitable_Ex_Names)
Show_A_Set(T_S, 'testing', Suitable_Ex_Names)

% Average could be computed either:
% (1) on parameter values
% (2) on function values
APF = 2;

ts_det = 0:10*24; % Time set for simulation of fermentation process

close all
Rem_impos_tab_WHOLE=[];% Загальна таблиця кількості видалених нереалізованих

% i -- індекс промислової траєкторії в пробній вибірці
for i = length(T_S)

    Rem_impos_tab = [];% Rem_impos_tab -- таблиця кількості видалених
    % нереалізованих траєкторій.

    I=T_S(i); % I -- індекс промислової траєкторії у повній вибірці
    L_S = L_S_WHOLE; % Reset learning set for every testing trajectory
    % Присвоємо значення параметрів для точкових траєкторій
    % навчальної вибірки в окремим матрицям:
    PA = A(L_S,:);
    PC = C(L_S,:);
    PE = E(L_S,:);

    switch control_by
        case 0 % управління по промисловій траєкторії
            fprintf ('\n%d. For trajectory %d %s\n',i,I,char(Suitable_Ex_Names(I)))
        case 1 % 1 -- по середній модельній траєкторії,
            fprintf ('\nFor average estimation of model trajectory\n')
        case 2 % 2 -- по песимістичній модельній траєкторії,
            fprintf ('\nFor pessimistic estimation of model trajectory\n')
        case 3 % 3 -- по оптимістичній модельній траєкторії.
            fprintf ('\nFor optimistic estimation of model trajectory\n')
    end

    switch control_by
        case 0 % управління по промисловій траєкторії

```



```

ts,Sreal,t,tit_n,Rem_impos_tab);

% Проведемо нечітку оптимізацію:
if bool_optimization && d == 0 % && any(d == [ 1 ])

% Генеруємо імя файлу результатів:
fname = ['d' int2str(d) '_' ];
switch control_by
    case 0
        fname = [fname int2str(I) '-' char(Suitable_Ex_Names(I))];
    case 1 % 1 -- по середній модельній траєкторії,
        fname = [fname 'average_estim'];
    case 2 % 2 -- по песимістичній модельній траєкторії,
        fname = [fname 'pessimistic_estim'];
    case 3 % 3 -- по оптимістичній модельній траєкторії.
        fname = [fname 'optimistic_estim'];
end

t_opt = d * 24; % Пошук температурного профілю починається
                % після моменту t_opt

if t_opt > 0
    [ts_tp, T_tp] = Tprev_till_t_opt(ts_all, T_all, t_opt);
else % Якщо процес щойно почався, то не задавати ніякого
    % початкового фрагменту температурного профілю
    ts_tp = []; T_tp = [];
end

% Номери цільових функцій:
% 1) значення основного виходу
% 2) значення нестійкого побічного виходу
% 3) значення стійкого побічного виходу
% 4) ширина коридору невизначеності при оцінюванні значення
% основного виходу

% Процес управління поділимо на дві частини:
if t_opt < 120
    % до 120 год. -- пріоритет надається оптимізації
    % рівня основного виходу;

    % ваги цільових функцій
    alp = [2 1 1 1];

    % Номер цільової функції, за якою відбувається
    % вибір температурного профілю для наступного
    % управління:
    tar_prior = 4;
else
    % після 120 год. -- пріоритет надаєть вужчому коридору
    % невизначеності.
    alp = [2 1 1 5];
    tar_prior = 1;
end

%
    if d > 1
        % Запуск ГА для пошуку температурного управління:
        [ts_all,T_all] = ga_up_center_compl(fname,X0,S0,PC,PE,[ts_tp
T_tp],alp,tar_prior, Whole_proc_Time);
    % elseif d == 0 % Завантижимо розв'язок з файлу, від місця де виникла
    помилка з часу

```

```

%                % попереднього запуску алгоритму.
%                [ts_all,T_all] =
loadthermalprofile('average_estim_iol_2007_12_12_18_0_27.mat');
%                elseif d == 1
%                [ts_all,T_all] =
loadthermalprofile('dl_average_estim_iol_2007_12_12_21_1_1.mat');
%                end

switch control_by
case {1,2,3}
% Поновлюємо модельну траєкторію та прогнозний коридор
% відповідно до знайденого продовження температурного профілю
[Sreal,ts,S_T_FULLL,Savg_FULLL,S_low_FULLL,S_up_FULLL] =
LTTCP_Recalculate_Sreal (Sreal,ts,ts_all,T_all,L_S_WHOLE,control_by);

% Перераховуємо нечітку траєкторію для оптимізованого температурного
профілю:
S_T    = S_T_FULLL(GetLSIndexesFromWhole(L_S, L_S_WHOLE),:);
S_low  = LTTCP_CalcLowerTraj(S_T);
S_up   = LTTCP_CalcUpperTraj(S_T);
Savg   = LTTCP_CalcAvgTraj(S_T);

WHOLE_CORRIDOR = [S_up_FULLL;Savg_FULLL;S_low_FULLL];
end

end

% Form reduced corridor
REDUC_CORRIDOR(:,d+1:end) = [S_up(d+1:end);
                             Savg(d+1:end);
                             S_low(d+1:end)];

% Додаємо новий набір точкових траєкторій:
S_T_EVOLUTION = [S_T_EVOLUTION; {S_T} {d} ];

if DM == 2

    ShowRealizations(ts,Sreal,t)

elseif DM == 3 | (DM == 4 & t == N)
    if DM == 4, figure, end
    hold on
    fprintf('%d\t',dts(2:end)),fprintf('\n')
    fprintf('%d\tарпер.\t',i)
    ShowCorridor(dts,WHOLE_CORRIDOR,'--',bool_uncertainty_percents)
    fprintf('%d\tадапт.\t',i)
    ShowCorridor(dts,REDUC_CORRIDOR,'-',bool_uncertainty_percents)
    ShowRealizations(ts,Sreal,t)
    if bool_disp_point_traj
        Display_PointTrajEvol(dts,S_T_EVOLUTION)
        ShowRealizations(ts,Sreal,t)
    end

    SetFontAndTicks([],FontSize),grid off
    legend({'S^+_{арпер.}','S^{середне}_{арпер.}','S^-_{арпер.}', ...
           'S^+_{адапт.}','S^{середне}_{адапт.}','S^-_{адапт.}'},
['Реалізація ' int2str(i)],'Interpreter','tex')

    xlabel('t, години'),ylabel('S, г/л')
end

```

```

    if bool_movie
        for delay=1:10
            MOVIE_FILE = addframe(MOVIE_FILE,getframe(gcf));
        end
        MOVIE_FRAME_INDEX = MOVIE_FRAME_INDEX+1;
    end
end
if bool_movie
    MOVIE_FILE = close(MOVIE_FILE);
end
% Загальна таблиця видалення нереалізованих траєкторій
Rem_impos_tab
Rem_impos_tab_WHOLE = [Rem_impos_tab_WHOLE; ones(size(Rem_impos_tab,1),1)*i
Rem_impos_tab];
end

[ans,ii] = sort(Rem_impos_tab_WHOLE(:,2));
ii=ii(end:-1:1);
fprintf('Таблиця видалення нереалізованих траєкторій\ni\tкількість
видалених\tt')

Rem_impos_tab_WHOLE(ii,:)

function [ts_all,T_all] = loadthermalprofile(fname)
load(fname)

function S = OnlyDownTraj (S)
for i=2:length(S)
    if S(i)>S(i-1)
        S(i)=S(i-1);
    end
end

function ShowCorridor(dts,CORRIDOR,lt,bool_uncertainty_percents)
global bw
colors = [
    [1 0 0] % red -- top
    [0 .5 0] % green -- average
    [0 0 1] % blue -- bottom
];

for i=1:3
    ltn = lt;
    ltn = ['. ' ltn];
    if bw
        plot(dts,CORRIDOR(i,:),['k' ltn ],'LineWidth',2 +
(i~=2)*.5,'MarkerSize',8)
    else
        plot(dts,CORRIDOR(i,:),ltn,'Color',colors(i,:), 'LineWidth',2)
    end
end

if ~bool_uncertainty_percents
    return
end

% Compute corridor bounds
TB = CORRIDOR(1,:); % of top side
BB = CORRIDOR(3,:); % of bottom side

```



```

% Calc.corr.width in percents
D = (TB-BB)/TB(1)*100;

global FontSize

% Subscribe appopr.points with width
for i=1:length(D)-1
    text(i*24+.05, TB(i+1)+0.5, [num2str(D(i+1),3) '%'], 'FontSize',FontSize)
    fprintf('%0.1f\t',D(i+1))
end
fprintf('\n')

function Display_PointTrajEvol(dts,S_T_EVOLUTION)
hold on
for i=1:size(S_T_EVOLUTION,1)
    S_T = S_T_EVOLUTION{i,1};
    d = S_T_EVOLUTION{i,2};
    plot(dts(1:d+1),S_T(:,1:d+1),'k.:')
end
plot(dts(d+1:end),S_T(:,d+1:end),'k.:')

function ShowRealizations(ts,Sreal,t)
global bw
hold on
if bw
    plot(ts(1:t)*24, Sreal(1:t),'pk',
ts(t+1:end)*24,Sreal(t+1:end),'*k','LineWidth',1.5)
else
    plot(ts(1:t)*24, Sreal(1:t),'pr',
ts(t+1:end)*24,Sreal(t+1:end),'pk','LineWidth',1.5)
end

function Show_A_Set(L_S, name, Suitable_Ex_Names)
fprintf('The %s set contains %d trajectories:\n',name,length(L_S))
for I = L_S(:)'
    fprintf('%s (#%d), ', char(Suitable_Ex_Names(I)),I)
end
fprintf('\n')

```

**Підпрограма для уточнення складу навчальної вибірки відповідно до одержаного спостереження:**

```

function [S_T, L_S, Savg, ...
    S_low, S_up, d, Sn, PC, PE,Rem_impos_tab] =
LTTCP_fuzzy_model_adaptive_refinement(S_T, L_S,L_S_WHOLE,...
    S_T_FULLL, Savg, S_low, ...
    S_up, ts,Sreal,t,tit_n,Rem_impos_tab)
global APF A C E X0 DM dts bw FontSize

M = 10; % Minimal number of trajectories

Intelli = 1; % Intelligence
RAC = 1; % Reduce at center
ChgBounds = true; % Change bounds when get to outside

% Let that a new measurement Sn is obtained
Sn = Sreal(t); % with value Sn

```

```

d = ts(t);    % at day d

tit_n = [tit_n ' при t = ' int2str(d*24) '. '];

LTTCP_DepictFuzzy(S_low, Savg, S_up, L_S, [tit_n 'До уточнення'], d, L_S_WHOLE,
S_T_FULLL, Sn);

if t > 1
    % Get rid of impossible trajectories
    % resulting from the last measurement
    [S_T, L_S, n_removed] = RemoveImpossibleTrajectories(S_T, L_S, Sreal(t-1));

    if n_removed > 0
        % Rem_impos_tab -- Таблиця кількості видалених нереалізованих
        % траєкторій.
        Rem_impos_tab = [Rem_impos_tab; n_removed d*24];
    end

    % Recompute average and boundary trajectories to take into account new
    % trajectories distribution.
    Savg = LTTCP_CalcAvgTraj(S_T);
    S_low = LTTCP_CalcLowerTraj(S_T);
    S_up = LTTCP_CalcUpperTraj(S_T);
end

fprintf('Day %d. ', d)

% Check if the value is inside bounds
if Sn < S_low(d+1)
    fprintf('The measurement Sn=%.4f is below lower boundary of %.4f\n', Sn,
S_low(d+1))

%     InB(t)=false; % outside bounds

% S_low becomes new Savg
Savg_new = S_low;

% Leave only M lower trajectories and
% calculate new upper boundary on them
[s_t, l_s] = Leave_M_lower(d, S_T, L_S, M);
%     [S_T, L_S] = Leave_M_lower(d, S_T, L_S, M);

S_up_new = LTTCP_CalcUpperTraj(s_t);
%     S_up_new = CalcUpperTraj(S_T);

% Lower bound will be created as a
% mirror projection of upper via average
S_dif = S_up_new - Savg_new;

S_low_new = Savg_new - S_dif;

if ChgBounds
    % Reset boundaries
    S_low(d+1:end) = S_low_new(d+1:end);
    Savg = Savg_new;
    S_up = S_up_new;
end

%     DepictFuzzy(S_low, Savg, S_up, L_S, tn, d, L_S_WHOLE, S_T_FULLL,
Sn)

```

```

    LTTCP_DepictFuzzy(S_low, Savg, S_up, l_s, [tit_n 'Вихід за нижню межу' ], d,
L_S_WHOLE, S_T_FULLL, Sn);
%       DepictFuzzy(S_low, Savg, S_up, S_T, ['Outside of lower boundary '
tit_n], d);

% Присвоємо значення параметрів для точкових траєкторій
% навчальної вибірки в окремим матрицям:
PA = A(l_s,:);
PC = C(l_s,:);
PE = E(l_s,:);

elseif Sn > S_up(d+1)
    fprintf ('The measurement Sn=%.4f is above upper boundary of %.4f\n', Sn,
S_up(d+1))

%       InB(t)=false; % outside bounds

% S_up becomes new Savg
Savg_new = S_up;

% Leave only M upper trajectories and calculate
% new lower boundary on them
[s_t, l_s] = Leave_M_upper(d, S_T, L_S, M);
%       [S_T, L_S] = Leave_M_upper(d, S_T, L_S, M);

S_low_new = LTTCP_CalcLowerTraj(s_t);
%       S_low_new = CalcLowerTraj(S_T);

% Upper bound will be created as a mirror
% projection of lower via average
S_dif = Savg_new - S_low_new;

S_up_new = Savg_new + S_dif;

if ChgBounds
    % Reset boundaries
    S_low = S_low_new;
    Savg = Savg_new;
    S_up(d+1:end) = S_up_new(d+1:end);
end

%DepictFuzzy(S_low, Savg, S_up, L_S, tn, d, L_S_WHOLE, S_T_FULLL, Sn)
LTTCP_DepictFuzzy(S_low, Savg, S_up, l_s, [tit_n 'Вихід за верхню межу' ],
d, L_S_WHOLE, S_T_FULLL, Sn);
%       DepictFuzzy(S_low, Savg, S_up, S_T, ['Outside of upper boundary '
tit_n], d);

% Присвоєння значення параметрів для точкових траєкторій
% навчальної вибірки в окремим матрицям:
PA = A(l_s,:);
PC = C(l_s,:);
PE = E(l_s,:);

else % otherwise the measurement is inside bounds
% and we can determine is there a trajectory
% between average and real realizations
%       InB(t)=true; % inside bounds
if d==0 | ~IsTraj_between_real_and_avg(d, Sn, Savg, S_T)
    fprintf ('We have no one trajectory between average and\n')
    fprintf ('real realizations. So we can use the average with \n')

```

```

RAC_flag = false;
if RAC
    if ~Intelli & d > 0
        RAC_flag = true;
    end
    % If center is got after 2nd day and
    % we still have many trajectories, almost all
    % learning set, then we reduce number
    % of trajectories to M for decreasing
    % the fuzzy prediction corridor
    if Intelli & d >= 3 & length(L_S) >= (length(L_S_WHOLE)-3)
        RAC_flag = true;
    end
end
if RAC_flag
    fprintf('reduced bounds to M trajectories. \n')
    [S_T, Savg, L_S] = ReduceAtCenter(Sn, d, S_T, L_S, M);
    S_low = LTTCP_CalcLowerTraj(S_T);
    S_up = LTTCP_CalcUpperTraj(S_T);
else
    fprintf('unchanged bounds. \n')
end

%DepictFuzzy(S_low, Savg, S_up, L_S, tn, d, L_S_WHOLE, S_T_FULLL, Sn)
LTTCP_DepictFuzzy(S_low, Savg, S_up, L_S, [tit_n 'Потрапляння в центр'
], d, L_S_WHOLE, S_T_FULLL, Sn);

else % Якщо існує траєкторія між середньою і поточною
%
    [s_t, Savg_new, l_s] = SeekNewAvg(Sn, Savg, d, S_T, L_S, M);
    [S_T, Savg_new, L_S] = SeekNewAvg(Sn, Savg, d, S_T, L_S, M);

%
    S_low_new = CalcLowerTraj(s_t);
    S_low_new = LTTCP_CalcLowerTraj(S_T);
%
    S_up_new = CalcUpperTraj(s_t);
    S_up_new = LTTCP_CalcUpperTraj(S_T);
%
    DepictFuzzy(S_low_new, Savg_new, S_up_new, s_t, tit_n, d)
%
    DepictFuzzy(S_low, Savg, S_up, L_S, tn, d, L_S_WHOLE,
S_T_FULLL, Sn)
    LTTCP_DepictFuzzy(S_low_new, Savg_new, S_up_new, L_S, [tit_n 'Після
уточнення'], d, L_S_WHOLE, S_T_FULLL, Sn)

% Set new values to lerning set
%
    S_T = s_t; L_S = l_s;
    Savg = Savg_new; S_low = S_low_new; S_up = S_up_new;

end
% Присвоєння значення параметрів для точкових траєкторій
% навчальної вибірки окремим матрицям:
PA = A(L_S, :);
PC = C(L_S, :);
PE = E(L_S, :);
end

function [S_T, L_S] = Leave_M_lower(d, S_T, L_S, M)

d=d+1; % To make easy access to index of day

% sort the S_T matrix on substrate concentration
% values at day d in ascending order:

```

```

[ans, sci] = sort(S_T(:,d));
S_T = S_T(sci,:);
L_S = L_S(sci);

% Leave only M lower trajectories
if size(S_T,1) < M
    M = size(S_T,1);
end

S_T = S_T(1:M,:);
L_S = L_S(1:M);

function [s_t, l_s, n_removed] = RemoveImpossibleTrajectories(S_T, L_S, Sn)
% An impossible trajectory is those,
% which finished substrate concentration
% is greater then concentration value
% in current day Sn
s_t = []; l_s = [];

for I=1:size(S_T,1)
    if S_T(I,end) <= Sn % Is the trajectory possible?
        s_t = [s_t; S_T(I,:)]; % If yeah, then save it
        l_s = [l_s L_S(I)];
    end
end

n_removed = size(S_T,1)-size(s_t,1);

function [S_T, L_S] = Leave_M_upper(d, S_T, L_S, M)

d=d+1; % To make easy access to index of day

% sort the S_T matrix on substrate concentration
% values at day d in ascending order:
[ans, sci] = sort(S_T(:,d));
S_T = S_T(sci,:);
L_S = L_S(sci);

% Leave only M upper trajectories
if size(S_T,1) < M
    M = size(S_T,1);
end

S_T = S_T(end-M+1:end,:);
L_S = L_S(end-M+1:end);

function [S_T, Savg, L_S] = ReduceAtCenter(Sn, d, S_T, L_S, M)
% Reduce corridor when there is no trajectory between
% real measurement and average trajectory

% We need to leave only M trajectories,
% minimal necessary number of trajectories for
% fuzzy modelling

d=d+1; % To make easy access to index of day

% sort the S_T matrix on substrate concentration
% values at day d in ascending order:
[ans, sci] = sort(S_T(:,d));
S_T = S_T(sci,:);
L_S = L_S(sci);

```

```

while size(S_T,1) > M % While we still need to reduce number of trajectories
    Savg = mean(S_T(:,d)); % Current average at day d
    % Now we determine best side in current reducing iteration
    if Sn > Savg % get rid from a left trajectory
        L_S = L_S (2:end);
        S_T = S_T (2:end,:);
    else % get rid from a right trajectory
        L_S = L_S (1:end-1);
        S_T = S_T (1:end-1,:);
    end
end

% Compute new average trajectory
Savg = LTTCP_CalcAvgTraj(S_T);

function [s_t_best, Savg_new, l_s_best] = SeekNewAvg(Sn, Savg, d, S_T, L_S, M)
% sort the S_T matrix on substrate concentration
% values at day d in ascending order:
[ans, sci] = sort(S_T(:,d+1));
S_T = S_T(sci,:);
L_S = L_S(sci);

% initial value of distance between Sn and new Savg
dsnsa_best = abs(Sn-Savg(d+1));
fromleft = Sn > Savg(d+1); % Determine side for leaving unnecessary trajectories

l_s_best = L_S;
s_t_best = S_T;

l_s_curr = L_S;
s_t_curr = S_T;

notenough = true;
Savg_new = Savg;

fprintf('We have a trajectory between Sreal=%.4f and Savg=%.4f\n', Sn,
Savg(d+1))

% M is minimal necessary number of trajectories for
% fuzzy modelling:

while notenough & size(s_t_curr,1) > M
    if fromleft
        l_s_curr = l_s_curr (2:end);
        s_t_curr = s_t_curr (2:end,:);
    else
        l_s_curr = l_s_curr (1:end-1);
        s_t_curr = s_t_curr (1:end-1,:);
    end

    Savg_new_curr = LTTCP_CalcAvgTraj(s_t_curr);

    dsnsa_curr = abs(Sn - Savg_new_curr(d+1));
    if dsnsa_curr < dsnsa_best
        dsnsa_best = dsnsa_curr;
        l_s_best = l_s_curr;
        s_t_best = s_t_curr;
        Savg_new = Savg_new_curr;
    else
        notenough = false;
    end
end

```

```

    end

end

fprintf('We got rid of %d-%d=%d ',length(L_S),length(l_s_best),length(L_S)-
length(l_s_best))
if fromleft
    fprintf('left')
else
    fprintf('right')
end
fprintf(' trajectories making Savg_new=%.4f\n', Savg_new(d+1))

function bb = IsTraj_between_real_and_avg(ts, Sreal, Savg, S_T)
% ts -- discrete nodes where, substrate measurements are.
% Sreal -- substrate measurements
N = length(Sreal);
bb = zeros(1,N);

for J=1:N
    K = ts(J)+1;
    bb(J) = any( (S_T(:,K)>=Sreal(J) & S_T(:,K)<Savg(K)) | ...
                (S_T(:,K)<=Sreal(J) & S_T(:,K)>Savg(K)) );
end

```

**ДОДАТОК 3****Акти про впровадження результатів дисертаційної роботи**





ЗАТВЕРДЖУЮ”  
Голова управління ВАТ „Бровар”  
С. М. Троян  
2008 р.

**АКТ**  
про впровадження результатів дисертаційної роботи  
Піговського Юрія Романовича

Ми, комісія в складі: Шикирява Світлана Володимирівна, Щебивовк Марія Михайлівна, Побурко Наталія Василівна склали даний акт про те, що надана нами база експериментальних вимірів динаміки процесів броварного бродіння була використана в дисертаційній роботі аспіранта кафедри комп’ютерних наук Тернопільського національного економічного університету Піговського Юрія Романовича при побудові наступних математичних моделей, методів та програмного забезпечення:

1. методи параметричної ідентифікації автономних та термодерованих систем Моно-Ієрусалимського з неспостережуваною змінною стану;
2. адаптивна математична модель динаміки технологічних процесів з мінімальними побічними виходами системи Моно-Ієрусалимського;
3. програмний комплекс для моделювання динаміки технологічних процесів з мінімальними побічними виходами системи Моно-Ієрусалимського та база даних для реєстрації експериментальних спостережень і результатів моделювання.

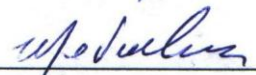
Результати математичного моделювання з використанням розроблених методів та математичних моделей показують, що для зменшення концентрації немонотонного та монотонного шкідливих побічних продуктів броварної промисловості (діацетилу та етил-ацетату) необхідно застосувати складний температурний профіль при управлінні ходом процесу броварного бродіння. Оскільки на даний час на підприємстві відсутні засоби для вимірювання концентрації монотонного побічного продукту (етил-ацетату) та апаратура для автоматичного підтримання складних температурних профілів, то експериментальних досліджень з перевірки ефективності цього складного профілю не проведено. Однак комісією були проведені інші експерименти в промислових умовах, які показують, що збільшення тривалості діацетил-паузи дозволяє зменшити концентрацію немонотонного побічного продукту (діацетилу) до 12%. Це в певній мірі сприяло зростанню обсягів реалізації продукції. Даний результат збігається з прогнозом, одержаним з використанням розроблених в дисертаційній роботі методів та математичних моделей, що може свідчити про їх адекватність.

Завідувач виробничої лабораторії



Шикирява С. В.

Технік-хімік хімічної лабораторії



Щебивовк М. М.

Мікробіолог



Побурко Н. В.

Головний бухгалтер



Білошицька Н.Л.

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з наукової роботи  
Тернопільського національного  
економічного університету  
д.т.н., проф. Мельник А.Ф.



\_\_\_\_\_ 2008 р.

про використання результатів кандидатської дисертаційної роботи  
«Математичні моделі нечітких процесів в системах Моно-Іерусалимського та  
методи їх ідентифікації» Піговського Юрія Романовича

Комісія у складі голови – завідувача кафедри комп’ютерних наук, керівника науково-дослідної роботи, д.т.н., проф. Дивака М. П. та членів: начальника науково-дослідної частини Письменного В. І. і начальника відділу прогнозування і маркетингу Лучка А. В. склали цей акт про те, що дослідження та результати дисертаційної роботи Піговського Ю. Р. використані під час виконання науково-дослідної роботи “Методи та засоби математичного моделювання складних систем на основі теоретико-множинного та інтервального підходів” (номер державної реєстрації 0106U012529), у якій автором розроблено засоби врахування невизначеності і неповноти експериментальних даних при параметричній ідентифікації та моделюванні періодичних систем Моно-Іерусалимського за допомогою адаптивних моделей нечітких процесів.

**Голова комісії**

завідувач кафедри комп’ютерних наук,  
керівник НДР, д.т.н., проф.

Дивак М.П.

**Члени комісії**

начальник НДЧ

Письменний В. І.

начальник відділу ПМ

Лучка А. В.



„ЗАТВЕРДЖУЮ”

Перший проректор  
Тернопільського національного  
економічного університету  
проф. Журавель Г. П.



2008 р.

про впровадження в навчальний процес Тернопільського національного економічного університету результатів дисертаційної роботи  
Піговського Юрія Романовича  
“Математичні моделі нечітких процесів в системах Моно-Ієрусалимського та методи їх ідентифікації”

Даний акт складений про те, що результати дисертаційної роботи аспіранта кафедри комп'ютерних наук Піговського Юрія Романовича на тему “Математичні моделі нечітких процесів в системах Моно-Ієрусалимського та методи їх ідентифікації” використані в навчальному процесі факультету комп'ютерних інформаційних технологій Тернопільського національного економічного університету для студентів напряму підготовки 0501 – “Економіка і підприємництво” спеціальності 8.050102 “Економічна кібернетика”.

При викладанні дисципліни “Теорія і методи оптимізації” у розділі “Методи стохастичної оптимізації”:

- надається інформація щодо оптимізаційних методів випадкового збурення (хаотичний пошук, випадковий спуск, статистичний градієнт, направляючі методи Растрігіна, SPSA) та методів еволюційної оптимізації (однокритеріальні та багатокритеріальні генетичні алгоритми, мурашині алгоритми, алгоритми бактеріального хемотаксису);
- використовується у процесі виконання лабораторних робіт розроблене у дисертаційній роботі програмне забезпечення для розв'язання однокритеріальних і багатокритеріальних оптимізаційних задач та вибору прийняттого розв'язку на множині Парето.

Завідувач кафедри економічної кібернетики,  
к.е.н., доцент

Гладій Г. М.

Доцент кафедри комп'ютерних наук,  
к.ф.-м.н.

Пасічник Р. М.



„ЗАТВЕРДЖУЮ”

Перший проректор

Тернопільського національного  
економічного університету  
проф. Журавель Г.П.



05 2008 р.

**АКТ**

про впровадження в навчальний процес Тернопільського національного економічного університету результатів дисертаційної роботи  
Піговського Юрія Романовича  
“Математичні моделі нечітких процесів в системах Моно-Ієрусалимського та методи їх ідентифікації”

Даний акт складений про те, що результати дисертаційної роботи аспіранта кафедри комп'ютерних наук Піговського Юрія Романовича на тему “Математичні моделі нечітких процесів в системах Моно-Ієрусалимського та методи їх ідентифікації” використані в навчальному процесі факультету комп'ютерних інформаційних технологій Тернопільського національного економічного університету для студентів напряму підготовки 0804 – „Комп'ютерні науки” спеціальності 6.080400 „Програмне забезпечення автоматизованих систем”.

При викладанні дисципліни “Моделювання систем” у розділі “Параметрична ідентифікація моделей динамічних систем”:

- надається інформація щодо створення динамічних моделей на основі систем звичайних диференціальних рівнянь, методів моделювання та параметричної ідентифікації побудованих моделей в середовищах MATLAB та SIMULINK.
- використовується у процесі виконання лабораторних робіт розроблене у дисертаційній роботі програмне забезпечення для параметричної ідентифікації моделей динамічних систем Моно-Ієрусалимського.

Декан факультету комп'ютерних  
інформаційних технологій,  
зав. кафедри комп'ютерних наук,  
д.т.н., проф.

Доцент кафедри комп'ютерних наук,  
к.е.н.

Дивак М. П.

Гончар Л. І.





### АКТ

про впровадження результатів кандидатської дисертації

**Піговського Юрія Романовича**

**“Математичні моделі нечітких процесів в системах Моно-Ієрусалимського та методи їх ідентифікації”**

у міжнародному науково-дослідному проєкті NATO PST.CLG.977647: “Development of Precision Control System for Thermal Objects Control”

Даний акт, підписаний керівником науково-дослідного проєкту від української сторони д.т.н., професором Саченком А. О., складено про те, що результати досліджень дисертаційної роботи Піговського Ю. Р. “Математичні моделі нечітких процесів в системах Моно-Ієрусалимського та методи їх ідентифікації” використані під час виконання українсько-бельгійського науково-дослідного проєкту по гранту NATO Linkage Collaborative Grants Program: “Development of Precision Control System for Thermal Objects Control” (реєстраційний номер PST.CLG.977647).

Під час виконання вищезгаданого проєкту Піговським Ю. Р. розроблено математичні моделі періодичних систем термообробки напівпровідникових матеріалів із змінною геометрією, а також метод їх параметричної ідентифікації, який дозволяє проводити термообробку в заданому технологічному режимі.

Математичні моделі включають основну модель системи термообробки і резистивні моделі її нагрівників. Метод ідентифікації ґрунтується на прогнозуванні температурного поля поверхні кремнієвої підкладки в геометрії печі, яка динамічно змінюється і оптимізації температурного режиму. Для його реалізації використано методи стохастичної оптимізації, скінченних елементів та апроксимаційного підходу до розв'язку крайових задач на прогнозних кроках. Останній дозволив в десятки разів скоротити час обчислень, що сприяє ефективному проведенню чисельних експериментів.

Розроблені математичні моделі і методи ідентифікації були запрограмовані в середовищі MatLab з використанням інструментального пакету PDE. Чисельні експерименти показали, що їх використання дозволяє зменшити похибку температурного управління періодичною системою термообробки в середньому на 1.14 °C і в два рази швидше досягати технологічної температури обробки. За модельними підрахунками це дозволить збільшити обсяг виробництва придатних інтегральних мікросхем в середньому на 2 %.

**Керівник проєкту від української сторони,  
науковий керівник НДІ ІКС,  
завідувач кафедри інформаційно-  
обчислювальних систем та управління,  
д.т.н., професор**

**Саченко А. О.**

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абалихин А. А. Некоторые аспекты дрожжевого менеджмента / А. А. Абалихин, Е. Г. Иванова // Пиво и напитки. – 2004. – № 6. – С. 26–28.
2. Алиев Р. А. Управление производством при нечеткой исходной информации / Р. А. Алиев, А. Э. Церковный, Г. А. Мамедова. – Москва : Энергоатомиздат, 1991. – 240 с.
3. Андронов А. А. Качественная теория динамических систем второго порядка / А. А. Андронов, Е. А. Леонтович, И. И. Гордон, А. Г. Майер. – Москва : Наука, 1966. – 568 с.
4. Аннемюллер Г. Границы и последствия размножения дрожжей в пивном сусле / Г. Аннемюллер, Х. -Й. Мангер // Brauwelt – Мир пива. – 2000. – № 2. – С. 12–17.
5. Ахназарова С. Л. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии / С. Л. Ахназарова, В. В. Кафаров. – Москва : Высшая школа, 1985. – 328 с.
6. Баснакьян И. А. Математическое описание основных кинетических закономерностей процесса культивирования микроорганизмов / И. А. Баснакьян, В. В. Бирюков, Ю. М. Крылов // Итоги науки и техники. Микробиология. – Москва, 1976. – Т. 5. – С. 5–75. – Деп. в ВИНТИ.
7. Беллман Р. Принятие решений в расплывчатых условиях / Р. Беллман, Л. Заде // Вопросы анализа и процедуры принятия решений. – Москва : Мир, 1976. – С. 172–215.
8. Вакербауер К. Пропагация дрожжей и активность чистой культуры дрожжей / К. Вакербауер, Х. Эверс, С. Кунерт // Brauwelt – Мир пива. – 1999. – № 2. – С. 24–29.
9. Введение в математическое моделирование / [В. Н. Ашихмин, М. Б. Гитман, И. Э. Келлер, О. Б. Неймарк, В. Ю. Столбов, П. В. Трусков, П. Г. Фрик] ; под ред. П. В. Трускова. – Москва : Университетская книга,

Логос, 2007. – 440 с.

10. Главачек Ф. Пивоварение / Ф. Главачек, А. Лхотский ; [пер. с чеш. И. В. Холодовой ; под. ред. А. П. Колпакчи]. – Москва : Пищевая промышленность, 1977. – 623 с.
11. Глик Б. Биодegradация токсичных соединений и утилизация биомассы / Б. Глик, Дж. Пастернак // Молекулярная биотехнология: принципы и применение / Б. Глик, Дж. Пастернак ; [пер. с англ. Н. В. Баскаковой, О. А. Колесниковой и др. ; под. ред. Н. К. Янковского]. – Москва : Мир, 2002. – Гл. 13. – С. 275–276.
12. Головки В. А. Нейроинтеллект: теория и применение / В. А. Головки. – Кн. 1: Организация и обучение нейронных сетей с прямыми и обратными связями. – Брест : БПИ, 1999. – 264 с.
13. Дворецкий Д. С. Компьютерное моделирование биотехнологических процессов и систем / Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий, Е. И. Муратова, А. А. Ермаков. – Тамбов : Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2005. – 80 с.
14. Домарецкий В. А. Технологія солоду та пива / В. А. Домарецкий. – Київ : Інкос, 2004. – 426 с.
15. Егоров Н. С. Биотехнология : [в 8-ми кн.] / Н. С. Егоров, А. В. Олескин, В. Д. Самуилов. – Кн. 1: Проблемы и перспективы. – Москва : Высшая школа, 1987. – 159 с.
16. Жаботинский А. М. Концентрационные автоколебания / А. М. Жаботинский – Москва : Наука, 1974. – 179 с.
17. Закгейм А. Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов / А. Ю. Закгейм. – [2-е изд.]. – Москва : Химия, 1982. – 288 с. – (Серия “Химическая кибернетика”).
18. Ивахненко А. Г. Индуктивный метод самоорганизации моделей сложных систем / А. Г. Ивахненко. – Київ : Наукова думка, 1981. – 296 с.
19. Иерусалимский Н.Д., Неронова Н.М. Количественная зависимость между концентрацией продуктов обмена и скоростью роста микроорганизмов // Докл. АН СССР. – Москва, 1965. – Т. 161. – С. 1437–1440.

20. Кафаров В. В. Принципы математического моделирования химико-технологических систем. Введение в системотехнику химических производств / В. В. Кафаров, В. Л. Перов, В. П. Мешалкин – Москва : Химия, 1974. – 344 с. – (Серия “Химическая кибернетика”).
21. Кафаров В. В. Системный анализ процессов химической технологии. Основы стратегии / В. В. Кафаров, И. Н. Дорохов – Москва : Наука, 1976. – 499 с.
22. Кафаров В. В. Системный анализ процессов химической технологии. Применение метода нечетких множеств / В. В. Кафаров, И. Н. Дорохов, Е. П. Марков. – Москва : Наука, 1986. – 359 с.
23. Князева Е. Н. Законы эволюции и самоорганизации сложных систем / Е. Н. Князева, С. П. Курдюмов – Москва : Наука, 1994. – 238 с.
24. Королева Н. С. Основы микробиологии и гигиены молока и молочных продуктов. – Москва : Пищевая промышленность, 1971. – 160 с.
25. Курдюмов С. П. Нестационарные структуры и диффузионный хаос / С. П. Курдюмов, Т. С. Ахромеева, Г. Г. Малинецкий, А. А. Самарский – Москва : Наука, 1992. – 511 с.
26. Ляпунов А. М. Общая задача об устойчивости движения / А. М. Ляпунов. – Москва : Гос. изд-во техн.-теор. лит, 1950. – 473 с.
27. Ляшенко И. Н. Оптимальное управление в кинетической системе Моно-Иерусалимского / И. Н. Ляшенко, Е. И. Ляшенко // Обчислювальна та прикладна математика. – Київ, 1996. – Вип. 80. – С. 47–58.
28. Мари Дж. Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии. Лекции о моделях / Дж. Мари ; пер. с англ. В. Г. Бабского ; под ред. А. Д. Мышкиса. – Москва : Мир, 1983. – 397 с.
29. Орловский С. А. Проблемы принятия решений при нечеткой исходной информации / С. А. Орловский – Москва: “Радио и связь”, 1981. – 286 с.
30. Пасічник Р. М. Вдосконалена система керування багатозонними термоагрегатами / Р. М. Пасічник, В. В. Кочан, Ю. Р. Піговський, М. Й. Дерлиця // Вісник технологічного університету Поділля. –



- Хмельницький : Хмельницький державний університет, 2004. – Ч. 1, Т. 1: Технічні науки, № 2 – С. 30–33.
31. Пасічник Р. М. Алгоритм управління перехідним процесом завантаження багатозонного термоагрегату / Р. М. Пасічник, В. В. Кочан, Ю. Р. Піговський // Вісник Тернопільського державного технічного університету. – Тернопіль, 2005. – Т. 10, № 3. – С. 118–126.
32. Пасічник Р. М. Ідентифікація моделі броварного бродіння в умовах невизначеності / Р. М. Пасічник, Ю. Р. Піговський // Вісник Вінницького політехнічного інституту. – Вінниця, 2007. – № 1. – С. 10–15.
33. Пасічник Р. М. Адаптивна модель динаміки систем мікроорганізмів в умовах невизначеності / Р. М. Пасічник, Ю. Р. Піговський // Вісник Хмельницького національного університету. – Хмельницький, 2007. – Т. 1: Технічні науки, № 2. – С. 36–40.
34. Пасічник Р. М. Моделювання термодерованих систем Моно-Ієрусалимського з мінімальними побічними виходами в умовах невизначеності / Р. М. Пасічник, Ю. Р. Піговський // Інформаційні технології та комп'ютерна інженерія. – Вінниця, 2008. – № 1 (11). – С. 69–75.
35. Пасічник Р. М. Ідентифікація системи Моно-Ієрусалимського з керованим зворотнім зв'язком / Р. М. Пасічник, Ю. Р. Піговський // Комп'ютинг. – 2008. – Т. 7, Вип. 1. – С. 146–152.
36. Перт С. Дж. Основы культивирования микроорганизмов и клеток / С. Дж. Перт. – Москва : Мир, 1978. – 333 с.
37. Пригожин И. Порядок из хаоса ; [пер. с англ.] / И. Пригожин. – Москва : Прогресс, 1986. – 432 с.
38. Романовский Ю. М. Математическая биофизика / Ю. М. Романовский, Н. В. Степанова, Д. С. Чернавский. – Москва : Наука, 1984. – 304 с.
39. Ротштейн А. П. Интеллектуальные технологии идентификации: нечеткая логика, генетические алгоритмы, нейронные сети / А. П. Ротштейн. – Винница : Универсум, 1999. – 320 с.

40. Ротштейн А. П. Нечеткий многокритериальный анализ вариантов с применением парных сравнений / А. П. Ротштейн, С. Д. Штовба // Известия РАН. Теория и системы управления. – 2001. – № 3. – С. 150–154.
41. Рубин А. Б. Кинетика биологических процессов / А. Б. Рубин, Н. Ф. Пытьева, Г. Ю. Ризниченко. – Москва : Изд-во Мос. ун-та, 1987. – 304 с.
42. Рубин А. Б. Биофизика / А. Б. Рубин – Москва : Университет, 1999. – Т. 1. – 448 с.
43. Рутковская Д. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы / Д. Рутковская, М. Пилиньский, Л. Рутковский ; [пер. с польск. И. Д. Рудинского]. – Москва : Горячая линия – Телеком, 2006. – 452 с.
44. Слоневский Р. В. Дробно-рациональные методы решения жёстких систем дифференциальных уравнений / Р. В. Слоневский, Р. Р. Столярчук // Фундамент. и прикл. матем. – 2006. – № 12 (4). – С. 203–208.
45. Уэбб Л. Ингибиторы ферментов и метаболизма / Л. Уэбб. – Москва : Мир, 1966.
46. Федоткин И. М. Математическое моделирование технологических процессов : [учеб. пособие для хим.-технол. спец. техн. вузов] / И. М. Федоткин. – Київ : Вища школа, 1988. – 415 с.
47. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике / Д. А. Франк-Каменецкий. – [3-е изд.]. – Москва : Наука, 1987. – 502 с.
48. Хакен Г. Синергетика / Г. Хакен ; [пер. с англ. В. И. Емельянова ; под ред. Ю. Л. Климонтовича, С. М. Осовца]. – Москва : Мир, 1980. – 405 с.
49. Чуб К. Ф. Дослідження сквовзних режимів при прямому керуванні кінетичною системою Моно-Ієрусалимського / К. Ф. Чуб // Вісник Київського університету. – Київ, 2000. – № 1. – С. 301–308. – (Серія: фіз.-мат. науки).
50. Эйкхофф П. Основы идентификации систем управления: оценивание параметров и состояния / П. Эйкхофф ; [пер. с англ. В. А. Лотоцкий,

- A. С. Мандель ; под ред. Н. С. Райбмана]. – Москва : Мир, 1975. – 681 с.
51. Andrés-Toro B. Multiobjective optimization and multivariable control of the beer fermentation process with the use of evolutionary algorithms / B. de Andrés-Toro, J. M. Girón-Sierra, P. Fernández-Blanco, J. A. López-Orozco, E. Besada-Portas // *Journal of Zhejiang University Science*. – 2004. – № 5 (4). – P. 378–389.
  52. Andrés-Toro B. A kinetic model for beer production under industrial operational conditions / B. de Andrés-Toro, J. M. Girón-Sierra, J. A. López-Orozco, C. Fernández-Conde, J. M. Peinado, F. Garcia-Ochoa // *Mathematics and Computers in Simulation*. – 1998. – № 48. – P. 65–74.
  53. Andrés-Toro B. Optimization of a batch fermentation process by genetic algorithms / B. de Andrés-Toro, J. M. Girón-Sierra, J. A. López-Orozco, C. Fernández-Conde // *IFAC ADCHEM, Proceedings of an International Symposium on Advance Control of Chemical Processes*. – 1997. – P. 183–188.
  54. Bellman R. E. Decision-Making in Fuzzy Environment / R. E. Bellman, L. A. Zadeh // *Management Science*. – 1970. – Vol. 17, № 4. – P. 141–160.
  55. Betlach M. R. Kinetic explanation for accumulation of nitrite, nitric oxide, and nitrous oxide during bacterial denitrification / M. R. Betlach, J. M. Tiedje // *Appl. Environ. Microbiol.* – 1981. – Vol. 42. – P. 1074–1084.
  56. Betlach M. R. Assimilatory nitrate uptake in *Pseudomonas fluorescens* studied using nitrogen-13 / M. R. Betlach, J. M. Tiedje, R. B. Firestone // *Arch. Microbiol.* – 1981. – Vol. 129. – P. 135–140.
  57. Blanco M. Monitoring alcoholic fermentation by joint use of soft and hard modeling methods / M. Blanco, A. C. Peinado, J. Mas // *Analytica Chimica Acta*. – 2006. – Vol. 556, Iss. 2. – P. 364–373.
  58. Brun-Mérimée S. Effect of glutathione and Maillard reaction products prepared from glucose or fructose with glutathione on polyphenoloxidase from apple – II. Kinetic study and mechanism of inhibition / S. Brun-Mérimée, C. Billaud, L. Louarme, J. Nicolas // *Food Chemistry*. – 2004. – Vol. 84. – P. 235–241.
  59. Bykovyy P. Genetic Algorithm Implementation for Distributed Security

- Systems Optimization / P. Bykovyy, Y. Pigovsky, V. Kochan, A. Sachenko, G. Markowsky, S. Aksoy // Proceedings of the IEEE Conference on Computational Intelligence for Measurement Systems and Applications: CIMSA 2008. – Istanbul, Turkey, 2008. – P. 120–124.
60. Caro I. Development of a kinetic model for the alcoholic fermentation of must / I. Caro, L. Perez, D. Cantero // Biotechnology and Bioengineering Journal. – 1991. – Vol. 38, Iss. 7. – P. 742–748.
61. Carrera J. Kinetic models for nitrification inhibition by ammonium and nitrite in a suspended and an immobilised biomass systems / J. Carrera, I. Jubany, L. Carvalho, R. Chamy, J. Lafuente // Journal on Process Biochemistry. – 2004. – Vol. 39, Iss. 9. – P. 1159–1165.
62. Carrillo-Ureta G. E. Genetic Algorithms for Optimal Control of Beer Fermentation / G. E. Carrillo-Ureta, P. D. Roberts, V. M. Becerra // Proceedings of the IEEE International Symposium on Intelligent Control, September 5–7. – México City, 2001. – P. 391–396.
63. Coello Carlos A. An updated survey of GA-based multiobjective optimization techniques / A. Coello Carlos // ACM Computing Surveys (CSUR). – 2000. – Vol. 32, Issue 2. – P. 109–143.
64. Coleman M. C. Temperature-dependent kinetic model for nitrogen-limited wine fermentations / Matthew C. Coleman, R. Fish, D. E. Block // Appl. Environ. Microbiol. – 2007. – Vol. 73, № 18. – P. 5875–5884.
65. Cornish-Bowden A. Fundamentals of enzyme kinetics / A. Cornish-Bowden. – Boston : Butterworth, Inc., 1979. – P. 200–210.
66. Counotte G. H. M. Calculation of  $K_m$  and  $V_{max}$  from substrate concentration versus time plot / G. H. M. Counotte, R. A. Prins // Appl. Environ. Microbiol. – 1979. – Vol. 38. – P. 758–760.
67. Cruz R. M. S. Modeling kinetics of watercress (*Nasturtium officinale*) colour changes due to heat and thermosonication treatments / R. M. S. Cruz, M. C. Vieira, C. L. M. Silva // Innovative Food Science and Emerging Technologies. – 2007. – Vol. 8. – P. 244–252.

68. Das I. A Closer look at drawbacks of minimizing weighted sums of objectives for Pareto set generation in multicriteria optimization problems / I. Das, J. E. Dennis // *Structural Optimization*. – 1997. – Vol. 14. – P. 63–69.
69. Deb K. Multi-objective Genetic Algorithms: Problem Difficulties and Construction of Test Problems // *Evolutionary Computation*. – USA, Massachusetts : Massachusetts Institute of Technology, 1999. – № 7 (3). – P. 205–230.
70. Deb K. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II / K. Deb, A. Pratap, S. Agarwal, T. Meyarivan // *IEEE Trans. on Evolutionary Computation*. – 2002. – Vol. 6, № 2. – P. 182–197.
71. Dorigo M. Ant system: optimization by a colony of cooperating agents / M. Dorigo, V. Maniezzo, A. Colomi // *IEEE Trans. on Systems, Man, and Cybernetics*. – 1996. – Part B: Cybernetics. – № 26 (1). – P. 29–41.
72. Dubois D. Fuzzy sets and probability: misunderstandings, bridges and gaps / D. Dubois, H. Prade // *Proceedings of the Second IEEE Conference on Fuzzy Systems*. – 1993. – P. 1059–1068.
73. Duggleby R. G. The analysis of progress curves for enzyme-catalyzed reactions by nonlinear regression / R. G. Duggleby, J. F. Morrison // *Biochim. Biophys.* – 1977. – Acta 481. – P. 297–312.
74. Elibol M. A kinetic model for actinorhodin production by *Streptomyces coelicolor* A3(2) / M. Elibol, M. Ferda // *Process Biochemistry* (Elsevier Science Ltd). – 1999. – № 34. – P. 625–631.
75. Engasser J. M. Kinetic modelling of beer fermentation / J. M. Engasser, I. Marc, M. Moll, B. Duteurtre // *Proceedings of the European Brewery Convention Congress*. – 1981. – № 18. – P. 579–586.
76. Fonseca C. M. Genetic algorithms for multiobjective optimization: formulation, discussion, and generalization / C. M. Fonseca, P. J. Fleming // *Genetic Algorithms: Proceedings of the Fifth International Conference*. – 1993. – P. 416–423.
77. Fourman M. P. Compaction of symbolic layout using genetic algorithms /

- M. P. Fourman // Genetic algorithms and their application: Proceeding of the First International Conference on Genetic Algorithms. – 1985. – P. 141–153.
78. Fugelsang K. C. Wine Microbiology: Practical applications and procedures / K. C. Fugelsang. – New York : Springer-Verlag, 1997. – 245 p.
79. Garcia A. I. Modelling of diacetyl production during beer fermentation / A. I. Garcia, L. A. Garcia, M. Diaz // Journal of the Institute of Brewing. – 1994. – № 100. – P. 179–183.
80. Gawel R. Brettanomyces Character in Wine / R. Gawel // Proceedings of Australian Society of Wine Education National Convention, 4th-6th of June 2004. – Hunter Valley, Australia, 2004. [Электронный ресурс]. – Режим доступа [http://www.aromadictionary.com/articles/brettanomyces\\_article.html](http://www.aromadictionary.com/articles/brettanomyces_article.html)
81. Gee D. A. A flavour model for beer fermentation / D. A. Gee, W. F. Ramirez // Journal of the Institute of Brewing. – 1994. – № 100. – P. 321–329.
82. Goldberg D. E. Genetic algorithms in search, optimisation, and machine learning / D. E. Goldberg. – MA (USA) : Addison-Wesley Publishing Company, 1989. – 432 p.
83. Gonçalves L. R. B. Mathematical modeling of batch and semibatch reactors for the enzymic synthesis of amoxicillin / L. R. B. Gonçalves, R. L. C. Giordano, R. C. Giordano // Process Biochemistry. – 2005. – Vol. 40. – P. 247–256.
84. Hajela P. Genetic search strategies in multicriterion optimal design / P. Hajela, C. -Y. Lin // Structural Optimization. – 1992. – № 4. – P. 99–107.
85. Holland J. H. Adaptation in Natural and Artificial Systems / J. H. Holland – Ann Arbor : University of Michigan Press, 1975. – 183 p.
86. Horn J. A niched Pareto genetic algorithm for multiobjective optimization / J. Horn, N. Nafpliotis, D. E. Goldberg // Proceedings of the First IEEE Conference on Evolutionary Computation. – 1994. – P. 82–87.
87. Impe Van J. Optimal adaptive control of fed-batch fermentation processes / Van J. Impe, G. Bastin // Control Engineering Practice. – 1995. – № 3 (7). – P. 939–954.
88. Karadagli F. A mathematical model for the kinetics of Methanobacterium

- bryantii M.o.H. considering hydrogen thresholds / F. Karadagli, B. E. Rittmann // *Biodegradation*. – 2007. – Vol. 18, № 4. – P. 453–464.
89. Kim I.Y. Adaptive weighted-sum method for bi-objective optimization: Pareto front generation / I. Y. Kim, O. L. de Weck // *Structural and Multidisciplinary Optimization* – 2005. – № 29. – P. 149–158.
90. Kinghtes C. D. Statistical analysis of nonlinear parameter estimation for Monod biodegradation kinetics using bivariate data / C. D. Kinghtes, C. A. Peters // *Biotechnology and Bioengineering*. – 2000. – Vol. 69, № 2. – P. 160–170.
91. Kobayashi M. On-Line Estimation and Control of Apparent Extract Concentration in Low-Malt Beer Fermentation / M. Kobayashi, T. Hiroshima, K. Nagahisa, H. Shimizu, S. Shioya // *Journal of the Institute of Brewing*. – 2005. – № 111 (2). – P. 128–136.
92. Kursawe F. A variant of evolution strategies for vector optimization / F. Kursawe // *Proceedings of the First Workshop “Parallel Problem Solving from Nature”*. Lecture Notes in Computer Science. – 1991. – Vol. 496. – P. 193–197.
93. Lagarias J. C. Convergence Properties of the Nelder-Mead Simplex Method in Low Dimensions / J. C. Lagarias, J. A. Reeds, M. H. Wright, P. E. Wright // *SIAM Journal of Optimization*. – 1998. – Vol. 9, № 1. – P. 112–147.
94. Li C. A kinetic study on enzymatic hydrolysis of a variety of pulps for its enhancement with continuous ultrasonic irradiation / C. Li, M. Yoshimoto, N. Tsukuda, K. Fukunaga, K. Nakao // *Biochemical Engineering Journal*. – 2004. – Vol. 19. – P. 155–164.
95. Lin Y. Validated solution of initial value problems for ODEs with interval parameters / Y. Lin, M. A. Stadtherr // *Proceedings of 2-nd NSF Workshop on Reliable Engineering Computing*. – Savannah, GA : Georgia Tech University, 2006. – 13 p.
96. Lubenova V. Adaptive algorithms for estimation of multiple biomass growth rates and biomass concentration in a class of bioprocesses / V. Lubenova,

- E. C. Ferreira // Proceedings of 4-th Portuguese Conference on Automatic Control "Controlo'2000". – 2000. – P. 289–294.
97. Luedeking R. A kinetic study of the lactic acid fermentation: Batch process at controlled pH / R. Luedeking, E. L. Piret // Journal on Biochem. Microbiol. Technol. Eng. – 1959. – Vol. 1, № 4. – P. 393–412.
98. Luong J. H. T. Kinetics of ethanol inhibition in alcohol fermentation // Biotechnology and Bioengineering Journal. – 1985. – Vol. 27, Iss. 3. – P. 280–285.
99. Mailleret L. Nonlinear adaptive control for bioreactors with unknown kinetics / L. Mailleret, O. Bernard, J. -P. Steyer // Automatica. – 2004. – № 40. – P. 1379–1385.
100. Martineau B. Reassessment of the Influence of Malolactic Fermentation on the Concentration of Diacetyl in Wines / B. Martineau, T. Henick-Kling, T. Acree // American Journal of Enology and Viticulture. – 1995. – № 46 (3). – P. 385–388.
101. Medawar W. Yeast growth: lag phase modelling in alcoholic media / W. Medawar, P. Strehaiano, M. -L. Délia // Journal on Food Microbiology (Elsevier Science Ltd.). – 2003. – № 20. – P. 527–532.
102. Michalewicz Z. Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs / Z. Michalewicz. – New York : Springer-Verlag, 1992. – 387 p.
103. Moosa S. Product inhibition by sulphide species on biological sulphate reduction for the treatment of acid mine drainage / S.Moosa, S.T.L.Harrison // Hydrometallurgy. – Vol. 83, 2006. – P. 214–222.
104. Moré J. J. The Levenberg-Marquardt algorithm: implementation and theory // Numerical Analysis. Lecture Notes in Mathematics / J. J. Moré. – New York : Springer-Verlag, 1977. – № 630. – P. 105–116.
105. Nabais R. C. Influence of calcium ion on ethanol tolerance of *Saccharomyces bayanus* and alcoholic fermentation by yeasts / R. C. Nabais, I. Sa-Correia, C. A. Viegas, J. M. Novais // Applied and Environmental Microbiology. – 1988. – № 54 (10). – P. 2439–2446.



106. Nielsen J.C. Control of flavor development in wine during and after malolactic fermentation by *Oenococcus oeni* / J. C. Nielsen, M. Richelieu // *Applied and Environmental Microbiology*. – 1999. – № 65 (2). – P. 740–745.
107. Pan J.-L. Kinetic study on substrate and product inhibitions for the formation of 7-amino-3-deacetoxy cephalosporanic acid from cephalosporin G by immobilized penicillin G acylase / J.-L.Pan, M.-J.Syu // *Biochemical Engineering Journal* – Vol. 23, 2005. – P. 203–210.
108. Pasichnyk R. Optimization approaches of multizone furnace loading process control / R. Pasichnyk, A. Vande Wouwer, Y. Pigovsky // *Proceedings of IEEE International Workshop on Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications (IDAACS'2005)*. – 2005. – P. 370–377.
109. Pasichnyk R. Modeling dynamics of microorganisms systems under uncertainty / R. Pasichnyk, Y. Pigovsky // *Proceedings of the IX-th International Conference “The Experience of Designing and Application of CAD Systems in Microelectronics (CADSM'2007)”*. – Lviv-Polyana, 2007. – P. 115–119.
110. Pigovsky Y. Model of periodical thermal chemical processes with fuzzy parameters / Y. Pigovsky // *Proceedings of the International conference “Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science” (TCSET'2006)*. – Lviv-Slavsko, 2006. – P. 202–204.
111. Pigovsky Y. An algorithm for minimization of detrimental outputs in low-temperature thermal-controlled processes / Y. Pigovsky // *Proceedings of the International conference “Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science” (TCSET'2008)*. – Lviv-Slavsko, 2008. – P. 105–106.
112. Robinson J.A. Kinetics of hydrogen consumption by rumen fluid, anaerobic digester sludge, and sediment / J. A. Robinson, J. M. Tiedje // *Applied and Environmental Microbiology*. – 1982. – № 44. – P. 1374–1384.
113. Robinson J.A. Nonlinear estimation of Monod growth kinetic parameters from

- a single substrate depletion curve / J. A. Robinson, J. M. Tiedje // *Applied and Environmental Microbiology*. – 1983. – Vol. 45, № 5. – P. 1453–1458.
114. Runkler T. A. Extended defuzzification methods and their properties / T. A. Runkler // *IEEE Transactions*. – 1996. – P. 694–700.
115. Schaffer J. D. Multiple objective optimization with vector evaluated genetic algorithm / J. D. Schaffer // *Genetic Algorithms and Their Application: Proceedings of the First International Conference on Genetic Algorithms*. – 1985. – P. 93–100.
116. Schaffer J. D. Multi-objective learning via genetic algorithms / J. D. Schaffer, J. J. Grefenstette // *Proceedings of the Ninth International Joint Conference on Artificial Intelligence*. – 1985. – P. 593–595.
117. Shampine L. F. The MATLAB ODE Suite / L. F. Shampine, M. W. Reichelt // *SIAM Journal on Scientific Computing*. – 1997. – Vol. 18, № 1. – P. 1–22. – Режим доступа: <http://audiophile.tam.cornell.edu/~als93/SR97.pdf>
118. Simkins S. Models for mineralization kinetics with the variables of substrate concentration and population density / S. Simkins, M. Alexander // *Applied and Environmental Microbiology*. – 1984. – Vol. 47, № 6. – P. 1299–1306.
119. Smets I. Y. Optimal adaptive control of (bio)chemical reactors: past, present and future / I. Y. Smets, J. E. Claes, E. J. November, G. P. Bastin, J. F. Van Impe // *Journal of Process Control*. – 2004. – № 14. – P. 795–805.
120. Srinivas N. Multiobjective optimization using nondominated sorting in genetic algorithms / N. Srinivas, K. Deb // *Evolutionary Computation*. – 1995. – № 2 (3). – P. 221–248.
121. Strayer R. F. Kinetic parameters of the conversion of methane precursors to methane in a hypereutrophic lake sediment / R. F. Strayer, J. M. Tiedje // *Applied and Environmental Microbiology*. – 1978. – № 36. – P. 330–340.
122. Syu M.-J. Neural Network Modeling for Predicting Brewing Fermentations / M.-J. Syu, G. T. Tsao, G. D. Austin, G. Celotto, T. D'Amore // *Journal of the American Society of Brewing Chemists*. – 1994. – № 52 (1). – P. 15–19.
123. Trelea I. C. Prediction of Confidence Limits for Diacetyl Concentration During

- Beer Fermentation / I.C.Trelea, S.Lандаud, E.Latrille, G.Corrieu // Journal of the American Society of Brewing Chemists. – 2002. – № 59 (2). – P. 77–87.
124. Trusek-Holownia A. An integrated process: ester synthesis in an enzymatic membrane reactor and water sorption / A. Trusek-Holownia, A. Noworyta // Biotechnology. – 2007. – № 130. – P. 47–56.
125. Xiao J. Ant colony system algorithm for the optimization of beer fermentation control / J.Xiao, Z.-K.Zhou, G.-X. Zhang // Journal of Zhejiang University Science. – 2004. – № 5 (12). – P. 1597–1603.
126. Xue F. Pareto-based Multi-Objective Differential Evolution / F.Xue, A.C.Sanderson, R.J.Graves // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. – 2003. – Vol. 2. – P. 862–869.
127. Yu-Hong D. Convergence properties of the BFGS algorithm / D. Yu-Hong // SIAM Journal on Optimization. – 2002. – Vol. 13, № 3. – P. 693–701.
128. Zimmermann H.-J. Fuzzy Set Theory and its Applications / H.-J.Zimmermann ; [3-rd ed.]. – Dordrecht : Kluwer Academic Publishers, 1996. – 315 p.
129. Zitzler E. Multiobjective evolutionary algorithms: a comparative case study and the strength Pareto approach / E. Zitzler, L. Thiele // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. – 1999. – Vol. 3, № 4. – P. 257–271.