УДК 519.876.5

Р. М. Пасічник, Ю. Р. Піговський
Тернопільський національний економічний університет
вул. Юності, 9, 46000 Тернопіль, Україна

Ідентифікація жорстких нелінійних моделей хіміко-технологічних систем

Удосконалено метод ідентифікації жорстких нелінійних моделей хіміко-технологічних систем в умовах неповної спостережуваності. Удосконалення ґрунтуються на виділенні області стійкості явної схеми та усуненні неінформативної ділянки з області застосування неявної схеми. Проаналізовано результати чисельних експериментів із застосуванням удосконаленого методу.

***Ключові слова**: ідентифікація, нелінійні моделі, жорсткі системи диференціальних рівнянь, хіміко-технологічні системи.*

Вступ

Технологічні процеси виробництва енергетичних ресурсів [1], харчових продуктів [2, 3], очищення води [4] та ґрунтів [5] відбуваються в хіміко-технологічних системах (ХТС). У [6] викладено основи моделювання ХТС на базі теорії систем. У [2, 7, 8] досліджено детерміновані моделі ХТС, які засновані на допущені про те, що існує деяка ідеальна структура, яка адекватно і з достатньою точністю описує реальний процес. Для ідентифікації цих моделей необхідно володіти достатньо точною базою експериментальних вимірювань усіх параметрів стану ХТС, що входять до моделі. Це можливо для повністю спостережуваних ХТС лабораторних масштабів. У той же час, у ХТС промислових масштабів спостережувана лише частина параметрів стану [3], і процеси в них проходять у нерівноважних умовах. Джерелом нерівноважних умов є просторова неоднорідність параметрів і різного роду флуктуації. Незначні дії, що не були враховані в моделі, можуть суттєво вплинути на вибір напрямку розвитку процесу [9]. Тому детерміновані моделі не спроможні дати задовільний прогноз динаміки ХТС промислових масштабів.

Моделі, що враховують невизначеність процесів, не вимагають допущень про існування ідеальної структури і повної спостережуваності. Вони допускають, що в будь-якій структурі присутня методична похибка, бо жодна з них не спроможна точно відобразити динаміку процесу. В [3] розроблено адаптивну модель невизначеності одного параметра стану ХТС. Джерелами невизначеності в ній виступають

© Р. М. Пасічник, Ю. Р. Піговський

варіації параметра від одної реалізації процесу до іншої та зашумленість спостережень, що були використані при ідентифікації. Прогноз моделі адаптивно уточнюється в міру надходження спостережень за станом процесу. Недолік цієї моделі полягає в неможливості прогнозування траєкторій інших змінних стану, що виступають джерелами невизначеності один для одного. Характер невизначеності в цих неврахованих змінних стану є суттєвим при розв'язанні задач управління ХТС.

Розвиток досліджень невизначеності ХТС здійснено в [10–15], де розроблено математичну модель, котра володіє, подібно до [3] адаптивними властивостями і враховує невизначеність, спричинену неповною спостережуваністю і нерівноважністю процесу. Слід відзначити, що її адаптивність не однопараметрична, як у Trelea, а багатопараметрична, тобто при надходженні нових спостережень динаміки процесу у звужені інтервалу прогнозування приймає участь не один, а всі модельні параметри. Ця особливість дозволяє враховувати невизначеність усіх змінних стану системи, даючи можливість розв'язувати задачі управління ХТС. Прогноз моделі ґрунтується на множині параметрів системи жорстких нелінійних диференціальних рівнянь, що описують множину індивідуальних реалізацій процесу. Задачі Коші для цих систем рівнянь утворюють пучок траєкторій, які служать основою оцінки невизначеності стану процесу.

Основними проблемами ідентифікації жорстких систем нелінійних диференціальних рівнянь в умовах неповної спостережуваності виступають низька точність і швидкодія процедури ідентифікації. Дана стаття присвячена розробці методів, що покликані подолати ці проблеми.

Постановка задачі

Розглянемо модель ізотермічного хіміко-технологічного процесу спиртового бродіння, що описується задачею Коші для автономної системи нелінійних диференціальних рівнянь [2]:

$$\begin{cases} X'(t) = \left(A_1 \dfrac{S(t)}{A_5 + P(t)} - A_2 \right) X(t), \\ S'(t) = -A_3 \dfrac{S(t)X(t)}{A_4 + S(t)}, \\ P'(t) = A_7 A_3 \dfrac{S(t)X(t)}{A_4 + S(t)} \left(1 - \dfrac{P(t)}{0,5S_0} \right), \end{cases} \tag{1}$$

$$X(0) = X_0 > 0, \quad S(0) = S_0 > 0, \quad P(0) = P_0 = 0, \quad 0 \le t \le t_{\max}, \tag{2}$$

де A_1, $A_2, \ldots A_7 \ge 0$ — коефіцієнти; $X(t)$, $S(t)$, $P(t)$ — концентрації мікроорганізмів, субстрату та етилового спирту.

Задача ідентифікації моделі (1), (2) полягає у виборі значень коефіцієнтів A_1, $A_2, \ldots A_7$ за критерієм мінімізації норми відхилення модельних траєкторій $X(t)$,

$S(t)$ та $P(t)$ від експериментально спостережених. Ця задача ускладнюється у випадку неспостережуваності однієї або кількох експериментальних траєкторій, що і має місце в дослідженнях, проведених у цій статті.

Процедура ідентифікації базується на розв'язанні задачі (1), (2) для пробних значень коефіцієнтів A_i. Проведемо аналіз стійкості чисельних схем її розв'язання, оскільки це забезпечує коректність отриманих результатів та суттєво впливає на тривалість всієї процедури ідентифікації.

Аналіз стійкості різницевих схем розв'язання автономної системи нелінійних диференціальних рівнянь

При інтерпретації умов стійкості різницевих схем прийнято користуватися модельним рівнянням

$$\frac{du}{dt} + \lambda u = 0\,,\ \lambda = \text{const} > 0\,,\ t > 0\,,\ u(0) = u_0\,; \tag{3}$$

його розв'язок $u(t) = u_0 \exp(-\lambda t)$ монотонно спадає при $\lambda > 0$ і

$$|u(t)| \le |u_0| \ \text{ при } \lambda \ge 0 \ \text{ для всіх } t \ge 0\,, \tag{4}$$

тобто рівняння (3) стійке при $\lambda \ge 0$ [16].

Уведемо на відрізку $0 \le t \le t_{\max}$ сітку $\{t_n = nh,\ n = 0,1,...\}$. Природною вимогою стійкості різницевих схем, що апроксимують модельне рівняння (3), є сітковий аналог нерівності (4)

$$|y_n| \le |y_0| \ \text{ для всіх } n = 1,2,... \tag{5}$$

де y_n — різницева апроксимація значення $u(t_n)$.

Аналізуючи апроксимацію рівняння (3) явною схемою Ейлера

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = -\lambda y_n\,, \quad y_{n+1} = (1 - h\lambda) y_n\,, \tag{6}$$

бачимо, що нерівність (5) виконується при $|1 - h\lambda| \le 1$ або $-1 \le 1 - h\lambda \le 1$, тобто при $h\lambda \le 2$. Якщо, наприклад, $h\lambda \ge 3$, тоді

$$\begin{aligned} |y_{n+1}| = |1 - h\lambda||y_n| \ge 2|y_n| \ge \ldots \ge 2^{n+1}|y_0|\,, \\ |y_n| \ge 2^n |y_0| \to \infty \quad \text{при} \quad n \to \infty\,, \end{aligned} \tag{7}$$

і схема стає нестійкою, бо вираз (7) протирічить умові стійкості (5). Таким чином, явна схема (6) умовно стійка при $h \le 2/\lambda$, $\lambda > 0$.

Система рівнянь, в якій присутні два або більше рівнянь вигляду (3) з коефі-

цієнтами $\lambda_1, \lambda_2, \ldots$ може бути жорсткою. Розв'язання жорстких систем явними схемами утруднене. Утруднення спричиняються необхідністю вибору спільного кроку h, що зв'язує різницеві апроксимації всіх рівнянь системи. Цей крок повинен задовольняти умову стійкості явної схеми $h \le 2 / \max_i \lambda_i$. Коли, наприклад, є два рівняння з коефіцієнтами λ_1, λ_2, де перший суттєво менший від другого $\lambda_1 <<< \lambda_2$, то величина кроку визначається тією компонентою системи, що спадає швидше, тобто другим коефіцієнтом: $h \le 2 / \lambda_2$. З цього випливають два негативні наслідки жорсткості. По-перше, може виявитися, що добуток кроку на перший коефіцієнт ($\lambda_1 h$) у (6) виходить за межі розрядної сітки машинної арифметики і при обчисленнях дорівнює машинному нулю, що негативно позначається на точності різницевої апроксимації розв'язку задачі. По-друге, малий крок h суттєво сповільнює обчислення.

На відміну від явних схем, неявні схеми безумовно стійкі. В цьому можна переконатися, застосувавши до того ж самого рівняння неявну схему Ейлера

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = -\lambda y_{n+1}, \quad y_{n+1} = y_n - h\lambda y_{n+1}, \quad y_{n+1} = \frac{y_n}{1 + h\lambda}. \tag{8}$$

Оскільки $1/(1 + h\lambda) \le 1$ для будь-яких $h\lambda \ge 0$, то умова (5) також виконується для будь-яких $h\lambda \ge 0$. Слід зауважити, що лише завдяки лінійності модельного рівняння (3) вдалося елементарними перетвореннями отримати просту формулу (8). Для нелінійних диференціальних рівнянь виконати такі перетворення значно важче, а іноді неможливо, тому в загальному випадку обчислення за неявною схемою вимагає залучення чисельних методів розв'язання нелінійних алгебричних рівнянь. Зрозуміло, що це призведе до збільшення обсягу обчислень у порівнянні з явним методом. Цей програш у збільшенні тривалості обчислень може мати негативні наслідки при управлінні хіміко-технологічними системами, де необхідно оперативно розв'язувати велику кількість задач ідентифікації.

Задамося ускладненим варіантом рівняння (3), що зустрічається при описанні задач хімічної кінетики, де коефіцієнт λ заміщено нелінійною функцією часу $\lambda = \lambda(t)$:

$$\frac{du}{dt} + \lambda(t)u = 0, \quad t > 0, \quad u(0) = u_0 \ge 0. \tag{9}$$

Якщо $\lambda(t) \le 0$, тоді для його розв'язання можна скористатися явною схемою

$$y_{n+1} = (1 - h_n \lambda_n) y_n, \tag{10}$$

де $\lambda_n = \lambda(t_n)$ — сіткова функція; h_n — крок у n-му вузлі різницевої схеми. Схема (10) буде стійка при будь-яких $h_n > 0$. У випадку ж коли $\lambda(t) > 0$, може виявитися, що $1 - h_k \lambda_k < 0$ в деякому k-му вузлі, і розв'язок задачі втрачає зміст, набуваючи від'ємних значень $y_{k+1} < 0$.

Системи, в яких присутні рівняння вигляду (9) можуть бути жорстким на тих же підставах, що й системи з рівняннями вигляду (3). Проте проблеми жорсткості тут ще й посилюються змінністю коефіцієнта $\lambda(t) > 0$, і важко навіть просто обчислити величини кроків $h_0, h_1, \ldots$, при яких задовольнялися би умови стійкості $1 - h_n\lambda_n \geq 0$ для всіх $n = 0,1,\ldots$, не кажучи вже про пошук способів уникнення наслідків жорсткості в зниженні точності апроксимацій і збільшенні тривалості обчислень.

У [16] рекомендується на ділянках, де $\lambda(t) > 0$, застосовувати неявний метод, а на ділянках, де $\lambda(t) < 0$ — явний. Проте такий підхід надто грубий, бо не дозволяє використати переваги вищої швидкодії явного методу на тих ділянках, де він є умовно стабільним. Крім того, в практиці моделювання зустрічаються рівняння, де $\lambda(t) \geq 0$ для всіх $t \geq 0$, зокрема, друге рівняння системи (1) і там, згідно з [16] слід було б користуватися неявним методом на всьому проміжку моделювання $0 \leq t \leq t_{\max}$. Однак, знайшовши області стабільності та нестабільності системи (1), можна пришвидшити процедуру її ідентифікації. Тому зупинимося на цьому питанні докладніше.

Перше та друге рівняння системи (1) можна записати у формі (9)

$$\begin{cases} X'(t) + \lambda_1(t)X(t) = 0, \\ S'(t) + \lambda_2(t)S(t) = 0, \\ X(0) = X_0 > 0, \qquad S(0) = S_0 > 0, \end{cases} \tag{11}$$

де $\lambda_1(t) = -A_1 S(t)/[A_5 + P(t)] + A_2$; $\lambda_2(t) = A_3 X(t)/[A_4 + S(t)]$. Оскільки $\lambda_2(t) \geq 0$ для всіх $t \geq 0$, то системи (11) і, відповідно (1), є жорсткими. Пікова жорсткість досягається в кінці процесу при $S(t) \to 0$, $X(t) \to 0$, коли $\lambda_1(t) \to A_2$, $\lambda_2(t) \to 0$, тобто $\lambda_2(t) <<< \lambda_1(t)$.

За аналогією зі схемою (10) різницева апроксимація другого рівняння системи (11)

$$S_{n+1} = (1 - h_n\lambda_n)S_n = \left(1 - h_n A_3 X_n/[A_4 + S_n]\right)S_n \tag{12}$$

стабільна для всіх k таких, що

$$h_k A_3 X_k/[A_4 + S_k] \leq 2, \tag{13}$$

і не втрачає зміст ($S_{k+1} \geq 0$) для всіх k таких, що

$$h_k A_3 X_k/[A_4 + S_k] \leq 1, \tag{14}$$

де X_k, S_k — сіткові апроксимації функцій $X(t_k)$, $S(t_k)$. Очевидно, що умова порушення співвідношення (14) більш строга ніж (13), тому при визначенні області стабільності слід орієнтуватися саме на неї.

Скориставшись оцінками максимальної концентрації мікроорганізмів $X^* = \max\limits_n X_n$ та максимальної величини кроку різницевої схеми $h^* = \max\limits_n h_n$, означимо область стабільності T наступним чином:

$$n \in \mathrm{T} \left| \frac{h^* A_3 X^*}{A_4 + S_n} \le 1, \right.$$

або

$$n \in \mathrm{T} \left| \frac{A_4 + S_n}{h^* A_3 X^*} \ge 1, \quad n \in \mathrm{T} \right| S_n \ge h^* A_3 X^* - A_4 . \tag{15}$$

Таким чином, можна знайти граничне значення $S_n = S_{bound}$, для якого виконується (15)

$$S_{bound} = h^* A_3 X^* - A_4 . \tag{16}$$

У практиці застосування різницевих схем прийнято, що максимальна величина кроку h^* є, щонайменше, функцією ширини часової області інтегрування $t_{\max}$, тому (16) можна записати функцією часу

$$S_{bound}(t) = h^*(t) A_3 X^* - A_4 . \tag{17}$$

Експериментальна траєкторія $S_{real}(t)$, за якою здійснюється ідентифікація, є сітковою функцією $S_{real,i} = S_{real}(\tau_i)$, де вузлами $\{\tau_0, ..., \tau_i, ..., \tau_{N-1}\}$ виступають моменти спостережень. Розв'язок (12) монотонно спадає, тому існує m-й вузол, до якого явна схема є стабільною ($S_n \ge S_{bound}(\tau_m)$) при всіх $n = 0,1,...$, для яких $t_n \le \tau_m$, а потім при $t_n > \tau_m$ стає нестабільною ($S_n < S_{bound}(\tau_m)$). Позначимо $t_{stable} = \tau_m$.

Співвідношенням (17) можна користуватися для знаходження області стабільності, проте в ньому присутня невідома оцінка максимальної концентрації мікроорганізмів X^*. Для її оцінювання використаємо допущення, що це значення досягається в момент часу t^*, до якого споживається половина активних вуглеводів субстрату $S^* = S(t^*) = 0,5 S_0$. Тоді з другого рівняння системи (1) отримаємо

$$S'(t^*) = -\frac{A_3 S^* X^*}{A_4 + S^*}, \quad X^* = -\frac{(A_4 + S^*) S'(t^*)}{A_3 S^*} . \tag{18}$$

Підставляючи (18) у (17), отримаємо

$$S_{bound}(t) = -h^*(t) \frac{(A_4 + S^*) S'(t^*)}{S^*} - A_4 , \tag{19}$$

де значення похідної $S'(t^*)$ можна наближено оцінити різницевим співвідношенням по експериментальній траєкторії концентрації субстрату:

$$S'(t^*) \approx \frac{S_{real,i+1} - S_{real,i-1}}{\tau_{i+1} - \tau_{i-1}} \Bigg| \min_i \left(S_{real,i} - S^*\right)^2, \tag{20}$$

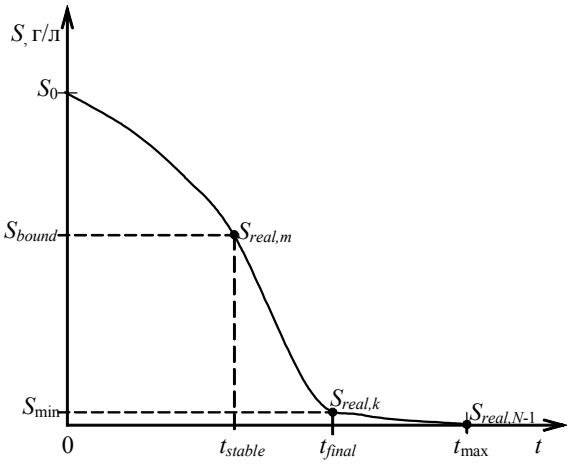
де $S_{real,i}$ — сітка спостережень; τ_i — моменти спостережень.

Користуючись формулами (19), (20), знаючи функцію $h^*(t)$ та оцінку коефіцієнта A_4, можна визначати область стабільності $[0, t_{stable}]$, де розрахунки проводять явною схемою. Оцінка коефіцієнта A_4 підбирається в ході ідентифікації деяким чисельним методом оптимізації, тому ширина області стабільності $[0, t_{stable}]$ повинна перераховуватися кожного разу, коли метод оптимізації змінить значення A_4. Цього можна уникнути, приймаючи до уваги низьку варіативність коефіцієнта A_4, і те, що він близький до нуля, що дозволяє спростити формулу (19) до

$$S_{bound}(t) = -h^*(t) S'(t^*). \tag{21}$$

Використання формули (21) замість (19) дасть додатковий виграш швидкодії в процедурі ідентифікації.

Отже при ідентифікації виділяються дві часові ділянки: стійка $[0, t_{stable}]$, де обчислення проводяться явною схемою, та нестійка $(t_{stable}, t_{\max}]$, де обчислення проводяться неявною схемою. Можна допустити, що завершальна частина нестійкої ділянки $(t_{final}, t_{\max}]$, де значення спостережень концентрації субстрату менші за деякий поріг точності $S_{\min}$, є малоінформативною при ідентифікації (див. рисунок). Вилучення малоінформативного фрагмента, звужуючи нестійку ділянку до $(t_{stable}, t_{final}]$, скоротило б тривалість процедури ідентифікації.



Часові ділянки траєкторії концентрації субстрату

Момент початку малоінформативної ділянки t_{final} можна обирати серед часових вузлів експериментальних спостережень τ_k, $k = m, m+1, ..., N-1$, починаючи з вузла $\tau_m = t_{stable}$, де завершується стійка ділянка. При цьому для кожного вузла можна встановити поріг точності у відсотках відносно початкової (максимальної) концентрації субстрату

$$\delta = \frac{S_{real,k}}{S_0} \cdot 100\ \%\,. \qquad (22)$$

Провівши експерименти, можна знайти моменти початку малоінформативної ділянки $t_{final} = \tau_k$, що дають бажане співвідношення між швидкодією процедури ідентифікації та точністю отриманих результатів.

Чисельні експерименти

Дослідження ефективності розроблених у даній роботі методів ідентифікації проведено на модельній задачі ідентифікації ізотермічного процесу спиртового бродіння при 12 ºС. У модельній задачі сітка спостережень концентрації субстрату $S_{real,k}$ складається з вузлів $\{\tau_k = 24k,\ k = 0,1,...\}$, вважається відомою оцінка максимальної концентрації мікроорганізмів $X^* = \max\limits_i X_{real,i}$. Сітка спостережень $S_{real,k}$ формується шляхом розв'язання задачі Коші (1), (2) неявною схемою з точними значеннями коефіцієнтів A_1, A_2,... A_7. Експериментальні траєкторії концентрації мікроорганізмів $X_{real}(t)$ та етилового спирту $P_{real}(t)$ вважаються неспостережуваними. Ефективність розроблених методів оцінювалась за точністю ідентифікації неспостережуваних траєкторій та тривалістю процедури ідентифікації. При цьому використовувались неявна, явна та комбінована схеми розв'язання задачі (1), (2). Похибка ідентифікації неспостережуваної траєкторії вважалася рівною середньоквадратичному відхиленню неспостережуваної траєкторії від свого точного значення. Ідентифікація за всіма розглянутими схемами проводилася від початкового наближення, що сформоване з використанням методів, розроблених в [10–15]. Похибка ідентифікації неспостережуваної траєкторії при початковому наближенні значень коефіцієнтів дорівнювала 11,40.

Вигляд схеми побудови наближеного розв'язку може бути заданий за допомогою значень параметрів t_{stable} та t_{final} (див. рисунок). Зокрема, при $t_{stable} = 0$, $t_{final} = t_{\max}$ отримуємо неявну схему. При $t_{stable} = t_{final}$ отримуємо явну схему. Коли ж $t_{final} > t_{stable} > 0$, отримуються комбіновані схеми. Дослідимо допустимі значення цих параметрів з урахуванням особливостей середовища MATLAB, яке використовувалось як інструментальне. Згідно з [17], у MATLAB чисельні методи розв'язання систем звичайних диференціальних рівнянь встановлюють максимальну величину кроку відповідно до функції

$$h^*(t_{\max}) = 0,1t_{\max}\,, \qquad (23)$$

де $t_{\max}$ — ширина області інтегрування.

Підставивши (23) в (21), отримаємо:

$$S_{bound}(t) = -0,1t \cdot S'(t^*)\,. \qquad (24)$$

Користуючись формулами (20) і (24) для поставленої модельної задачі, отримаємо $t_{stable} = \tau_4 = 96$. Враховуючи те, що при обчисленнях використано неточні оцінки, взяті зі значним запасом, а також те, що викладки зроблено для явного методу Ейлера, який має перший порядок точності, хоча насправді в MATLAB використовувався метод Рунге-Кутта четвертого порядку, оцінку t_{stable} можна дещо збільшити. Це можна здійснити за допомогою наступного співвідношення:

$$t_{stable} = t'_{stable} + \alpha t_{\max}, \tag{25}$$

де t'_{stable} — попередня оцінка області стабільності; α — константа ($\alpha \geq 0$). Емпірично досліджено, що прийнятним є значення $\alpha = 0{,}1$, при якому $t_{stable} = 96 + {+0{,}1 \cdot 240 = 120}$. Для сформованої сітки спостережень, прирівнюючи момент початку малоінформативної ділянки до моменту завершення стійкої ділянки ($t_{final} = t_{stable} = \tau_5$), поріг точності δ (22) не перевищує 5 %. У наступних вузлах $t_{final} = \{\tau_6, \tau_7, \tau_8, \tau_9, \tau_{10}\}$ поріг точності δ не перевищує 0,01 %.

У таблиці показано похибки і тривалість процедури ідентифікації при використанні неявної, явної та комбінованих схем розв'язання задач Коші. Слід відзначити, що у функції мети при ідентифікації використовуються оцінки похибок по спостережуваній траєкторії концентрації субстрату, порядок якої становить 10^{-2}. Відносні значення похибок обчислюються відносно похибки неявної схеми (стрічка «Неявна»). Стовпчик «Тривалість, секунди» наводить загальну тривалість процедури ідентифікації, а стовпчик «Відносна тривалість» — тривалість процедури ідентифікації у відсотках відносно неявної схеми.

Похибки ідентифікації та облік витрат часу на ідентифікацію

Схема	Абсолютна похибка	Відносна похибка	Тривалість, секунди	Відносна тривалість
Неявна	6,51	100 %	5,25	100 %
Явна	2,06	32 %	2,41	46 %
Комбінована, $t_{final} = \tau_6 = 144$	1,46	22 %	5,61	107 %
Комбінована, $t_{final} = \tau_7 = 168$	0,76	12 %	6,11	116 %
Комбінована, $t_{final} = \tau_8 = 192$	0,92	14 %	4,87	93 %
Комбінована, $t_{final} = \tau_9 = 216$	0,78	12 %	4,55	87 %
Комбінована, $t_{final} = \tau_{10} = 240$	0,59	9 %	4,62	88 %

Першим проведено експеримент, де неявна схема використовувалася на всій протяжності експериментально-спостереженої траєкторії: $t_{stable} = 0$, $t_{final} = t_{\max}$. Похибка ідентифікації в цьому експерименті (стрічка «Неявна» в таблиці) перевищує похибки комбінованих явно-неявних схем при всіх τ_k. Тобто, незважаючи на те, що сітку спостережень сформовано неявною схемою Розенброка, ця схема дає найгіршу точність ідентифікації.

Далі проведено експеримент, де ідентифікація здійснювалася по стійкій ділянці експериментально-спостереженої траєкторії ($t_{stable} = t_{final} = 120$ годин) з викори-

станням тільки явної схеми (стрічка «Явна» в таблиці). У результатах цього експерименту спостерігається суттєве зменшення тривалості ідентифікації — понад вдвічі швидше порівняно з неявною схемою (відносна тривалість — 46 %). Відносна похибка ідентифікації при цьому становить 32 %. Приріст швидкодії відбувся за рахунок зменшення середньої тривалості обчислення функції мети явною схемою в порівнянні з неявною схемою з 33 до 11 мілісекунд, тобто втричі, покращення точності є наслідком четвертого порядку апроксимації застосованої явної схеми Рунге-Кутта, що є значно вищою від другого порядку неявної схеми Розенброка.

Наступні експерименти присвячено дослідженню комбінованого використання явної та неявної схем при ідентифікації на інформативній ділянці спостереженої траєкторії ($t_{final} = \tau_k > t_{stable} > 0$). З результатів цих експериментів видно, що комбінована схема забезпечує подальше підвищення точності ідентифікації. Починаючи від комбінованої схеми при $t_{final} = \tau_7 = 168$, точність суттєво збільшується: 12 % похибки (відносно неявної схеми). Далі, при $\tau_8 = 192 \le t_{final} \le \tau_{10} = 240$ помітні незначні коливання похибки, які, проте, не порушують загальної тенденції зменшення похибки, і при $t_{final} = \tau_{10} = 240$ похибка досягає значення в 9 % відносно неявної схеми. Коливання значень похибки можна пояснити тим, що функція мети в ідентифікації оцінюється по спостережуваній траєкторії. Неспостережувані траєкторії не беруть безпосередньої участі у формуванні функції мети, тому по них допускаються незначні коливання.

Висновок

Удосконалено методи ідентифікації жорсткої автономної системи нелінійних диференціальних рівнянь, що описує хіміко-технологічний процес бродіння. Вдосконалення полягають у розроблених методах комбінування явної і неявної різницевих схем шляхом виділення області стійкості явної схеми та усунення неінформативної ділянки з області застосування неявної схеми. Методи розроблені на основі дослідження властивостей диференціальних рівнянь і різницевих схем, що їх апроксимують.

З отриманих результатів можна зробити висновок, що основна мета дослідження досягнута, а саме — в усіх випадках використання розробленого методу отримано підвищення точності ідентифікації неспостережуваної траєкторії у порівнянні з неявною схемою (до 9 % похибки відносно неявної схеми). Встановлено також, потенційну можливість зменшення тривалості процедури ідентифікації до 46 % відносно неявної схеми. В наступному доцільно дослідити можливість поєднання досягнутих переваг у підвищенні швидкодії та точності ідентифікації.

1. *Wu B.* Three-Dimensional Numerical Simulation Model of Biogas Production for Anaerobic Digesters / B. Wu, E.L. Bibeau, K.G. Gebremedhin // Canadian Biosystems Engineering. — 2009. — Vol. 51. — P. 81–87.

2. *Multiobjective* Optimization and Multivariable Control of the Beer Fermentation Process with the Use of Evolutionary Algorithms / B. de Andres-Toro, J.M. Giron-Sierra, P. Fernandez-Blanco [et al.]

// Journal of Zhejiang University Science. — 2004. — N 5(4). — P. 378–389.

3. *Trelea I.C.* Prediction of Confidence Limits for Diacetyl Concentration During Beer Fermentation / I.C. Trelea, S. Landaud, E. Latrille, G. Corrieu // Journal of the American Society of Brewing Chemists. — 2002. — N 59(2). — P. 77–87.

4. *Mailleret L.* Nonlinear Adaptive Control for Bioreactors with Unknown Kinetics / L. Mailleret, O. Bernard, J.–P. Steyer // Automatica. — 2004. — N 40. — P. 1379–1385.

5. *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, N 2. — P. 160–170.

6. *Кафаров В.В.* Принципы математического моделирования химико-технологических систем. Введение в системотехнику химических производств / В.В. Кафаров, В.Л. Перов, В.П. Мешалкин. — М.: Химия, 1974. — 344 с.

7. *Кафаров В.В.* Системный анализ процессов химической технологии. Основы стратегии / В.В. Кафаров, И.Н. Дорохов. — М.: Наука, 1976. — 499 с.

8. *Рубин А.Б.* Кинетика биологических процессов / А.Б. Рубин, Н.Ф. Пытьева, Г.Ю. Ризниченко. — М.: Изд-во Мос. ун-та, 1987. — 304 с.

9. *Пригожин И.* Порядок из хаоса; пер. с англ. / И. Пригожин. — М.: Прогресс, 1986. — 432 с.

10. *Пасічник Р.М.* Ідентифікація моделі броварного бродіння в умовах невизначеності / Р.М. Пасічник, Ю.Р. Піговський // Вісник Вінницького політехнічного інституту. — 2007. — № 1. — С. 10–15.

11. *Пасічник Р.М.* Адаптивна модель динаміки систем мікроорганізмів в умовах невизначеності / Р.М. Пасічник, Ю. Р. Піговський // Вісник Хмельницького національного університету. — 2007. — Т. 1: Технічні науки. — № 2. — С. 36–40.

12. *Пасічник Р.М.* Моделювання термокерованих систем Моно-Ієрусалимського з мінімальними побічними виходами в умовах невизначеності / Р.М. Пасічник, Ю.Р. Піговський // Інформаційні технології та комп'ютерна інженерія. — 2008. — № 1(11). — С. 69–75.

13. *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.

14. *Піговський Ю.Р.* Параметрична ідентифікація моделей динаміки низькотемпературних термокерованих процесів / Ю.Р. Піговський // Відбір і обробка інформації. — 2008. — № 28(104). — С. 53–60.

15. *Піговський Ю.Р.* Адаптивна математична модель нечітких процесів у системах Моно-Ієрусалимського / Ю.Р. Піговський // Проблеми інформатизації та управління. — 2008. — № 1(23). — С. 255–262.

16. *Самарский А.А.* Введение в численные методы: учебн. пособие для вузов. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. — 288 с.

17. *The Mathworks, Inc.* Step for Numeric Integration [Електронний ресурс]. — Режим доступу http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/toolbox/simbio/index.html?/access/helpdesk/help/toolbox/simbio/ref/maxstep.html

Надійшла до редакції 03.03.2010