

SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE

**FAKULTA CHEMICKÉJ A POTRAVINÁRSKEJ
TECHNOLÓGIE**

Evidenčné číslo: FCHPT-5414-81521

Garantovaná identifikácia a jej využitie pre hybridné modelovanie

DIPLOMOVÁ PRÁCA

2020

Bc. Matej Kintler

SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE
FAKULTA CHEMICKÉJ A POTRAVINÁRSKEJ
TECHNOLÓGIE

Evidenčné číslo: FCHPT-5414-81521

**Garantovaná identifikácia a jej
využitie pre hybridné modelovanie**

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Študijný program: automatizácia a informatizácia v chémii a potravinárstve
Študijný odbor: kybernetika
Školiace pracovisko: Oddelenie informatizácie a riadenia procesov
Vedúci práce: doc. Ing. Radoslav Paulen, PhD.

2020

Bc. Matej Kintler



ZADANIE DIPLOMOVEJ PRÁCE

Študent: **Bc. Matej Kintler**
ID študenta: 81521
Študijný program: automatizácia a informatizácia v chémii a potravinárstve
Študijný odbor: kybernetika
Vedúci práce: doc. Ing. Radoslav Paulen, PhD.
Miesto vypracovania: Oddelenie informatizácie a riadenia procesov

Názov práce: **Garantovaná identifikácia a jej využitie pre hybridné modelovanie**

Jazyk, v ktorom sa práca vypracuje: slovenský jazyk

Špecifikácia zadania:

V procesnom priemysle často nastáva situácia, keď je časovo a finančne náročné vytvoriť (mechanický, fyzikálny) matematický model riadeného procesu. V týchto prípadoch sa ako veľmi účinná náhrada za takýto model uplatňujú približné vstupno-výstupné modely. Tieto majú často pre jednoduchosť lineárny tvar a musia byť identifikované z nameraných údajov. Cieľom tejto práce je skúmať identifikáciu vstupno-výstupných modelov pomocou metódy garantovaného odhadu a možnosti použitia tejto metódy pri hybridnom modelovaní, t.j. pri kombinácii vstupno-výstupných modelov s jednoduchými (nepresnými) mechanickými modelmi.

Úlohy:

- Osvojenie si problematiky garantovaného odhadu
- Použitie metódy garantovaného odhadu pre identifikáciu vstupno-výstupných modelov
- Použitie metódy garantovaného pre hybridné modelovanie
- Porovnanie hybridného a vstupno-výstupného modelovania na zvolenom príklade

Zoznam odbornej literatúry:

1. N. Bhutani, G. P. Rangaiah, A. K. Ray. First-Principles, Data-Based, and Hybrid Modeling and Optimization of an Industrial Hydrocracking Unit. Industrial & Engineering Chemistry Research 2006 45 (23), 7807-7816
DOI: 10.1021/ie060247q

Riešenie zadania práce od: 17. 02. 2020

Dátum odovzdania práce: 07. 06. 2020

Bc. Matej Kintler
študent

doc. Ing. Michal Kvasnica, PhD.
vedúci pracoviska

prof. Ing. Miroslav Fikar, DrSc.
garant študijného programu

Čestné vyhlásenie

Vyhlasujem, že predloženú záverečnú prácu som vypracoval(a) samostatne pod vedením vedúceho záverečnej práce, s použitím odbornej literatúry a ďalších informačných zdrojov, ktoré sú citované v práci a uvedené v zozname použitej literatúry. Ako autor(ka) záverečnej práce ďalej prehlasujem, že som v súvislosti s jej vytvorením neporušil autorské práva tretích osôb.

.....

podpis študenta

Podakovanie

Na tomto mieste by som sa chcel poďakovať vedúcemu diplomovej práce doc. Ing. Radoslavovi Paulenovi, PhD. za všetky odborné rady a pripomienky, ktoré mi pomohli pri vypracovaní záverečnej práce a za vedomosti, ktoré mi predal a sú pre mňa cenným prínosom do života. Veľká vďaka patrí aj mojim rodičom, sestre a priateľke za podporu a trpezlivosť nielen pri vypracovávaní diplomovej práce, ale počas celého štúdia.

Abstrakt

Odlišné správanie skutočného zariadenia a jeho matematického opisu je v oblasti automatizácie pomerne známa záležitosť, ktorá predstavuje závažný problém, najmä v situácii, keď sa snažíme zabezpečiť optimálnu prevádzku zariadenia. Veľa vedeckých publikácií sa venuje práve tejto problematike, ale riešenia, ktoré ponúkajú sú často veľmi komplikované na realizáciu alebo vedú k neistým výsledkom. Táto práca prináša nový prístup k dynamickej optimalizácii zariadenia, ktorý je založený na hybridnom modelovaní s použitím metódy garantovaného odhadu parametrov. Funkčnosť tejto metódy sme sa rozhodli demonštrovať na zariadení, ktoré predstavuje prietokový biochemický reaktor, pretože ponúka veľa problémov s modelovaním v dôsledku prítomnosti živých organizmov. Výsledky experimentov ukázali, že hybridné modely môžu byť použité na optimalizáciu prevádzky zariadenia, ale iteračným prístupom nás dokážu dostať iba do blízkeho okolia optima zariadenia a to v závislosti od hladiny šumu. Ale na rozdiel od iných metód je konvergencia hybridných modelov výrazne rýchlejšia a menej citlivá na šum merania, čo je obrovskou výhodou pre procesy s veľkými časovými konštantami.

Abstract

The different behavior of the real plant and its mathematical description is a relatively well-known issue in the field of automation. It is a serious problem, especially in a situation where we try to ensure optimal operation of the plant. Many scientific publications address this issue, but the solutions they offer are often very complicated to implement or lead to uncertain results. This work brings a new approach to plant real-time optimization which is based on hybrid modeling using the guaranteed parameter estimation method. We decided to demonstrate the functionality of this method on a plant that is represented by a chemostat. The reason is that it includes many problems with modeling due to the presence of living organisms. The results of experiments showed that hybrid models can be used for operation optimization of the plant but an iterative approach can only get us to the optimum immediate surroundings, depending on the noise level. Unlike the other methods, the convergence of hybrid models is significantly faster and less sensitive to measurement noise, which is a great advantage for processes with large time constants.

Obsah

Podakovanie	v
Abstrakt	vii
Abstract	ix
Úvod	1
I Dátové modelovanie a Garantovaný odhad parametrov	3
1 Dátové modelovanie	5
1.1 Dátové modely	5
1.2 Odhad parametrov	8
1.2.1 Požiadavky na odhad parametrov	8
1.2.2 Metódy statickej identifikácie	9
2 Garantovaný odhad parametrov	13
2.1 Grafická ilustrácia GOP	13
2.2 Mnohorozmerový prípad	15
2.3 Odhad rádu modelu	16

2.4	Verifikácia dátových modelov	17
2.4.1	Štandardné kritéria	17
2.4.2	Pareto front	19
2.5	Identifikácia FIR modelu	20
2.6	Identifikácia ARX modelu	21
2.7	Príklady identifikácie	22
II	Hybridné modelovanie a jeho využitie v praxi	27
3	Hybridné modelovanie	29
3.1	Hybridné modely	29
3.2	Optimalizácia prevádzky dynamických systémov	31
3.2.1	Dvojkroková optimalizácia	32
3.2.2	Schéma úpravy modifikátora	33
3.2.3	Použitie hybridných modelov	34
4	Optimalizácia biochemického reaktora	37
4.1	Biochemický reaktor - Základné informácie	37
4.1.1	Rozdelenie biochemických reaktorov	38
4.1.2	Parametre opisujúce biochemický reaktor	38
4.2	Matematické modelovanie zariadenia	40
4.2.1	Základné mechanistické modely biochemického reaktora	41
4.3	Analýza matematických modelov	42
4.3.1	Dynamika	42
4.3.2	Stabilita	44
4.4	Ekonomická optimalizácia	46

5	Výsledky	57
5.1	Trénovanie dátových modelov	57
5.2	Korekcia optima nominálneho modelu	63
5.2.1	Dvojkroková optimalizácia	63
5.2.2	Schéma úpravy modifikátora	65
5.2.3	Použitie hybridných modelov	69
5.2.4	Porovnanie prístupov	78
6	Záver	81
	Literatúra	83

Úvod

V tomto momente, ako práve čítate tento text, prebieha okolo nás množstvo procesov, ktoré zabezpečujú fungovanie dnešnej spoločnosti bez toho, aby si to človek vôbec uvedomoval. Ťažko povedať, či si ešte dokážeme predstaviť život bez týchto vymožeností. O čom je reč? Distribúcia elektrickej energie, pitnej vody, plynu, separácia odpadu či čistenie odpadových vôd alebo každodenný prísun potravín, liečiv, pohonných hmôt, oblečenia atď. Asi je zrejmé, že takto by sme mohli pokračovať ešte veľmi dlho. Čo sa však snažíme ozrejmiť je, že väčšina týchto procesov je nejakým spôsobom automatizovaná, čo nám umožňuje vykonávať daný proces efektívne, kvalitne a hlavne bezpečne [8].

Základným kameňom väčšiny pokročilejších metód automatizácie je matematický model zariadenia. V princípe existujú dva prístupy k matematickému modelovaniu. Prvý prístup je založený na fyzikálnych zákonoch, ktorý vedie k takzvaným mechanistickým modelom. Problémom takéhoto modelovania je, že s rastúcimi požiadavkami na kvantitu, kvalitu, bezpečnosť alebo efektivitu, rastie aj zložitosť priemyselných procesov — jednak štruktúra zariadenia a jednak stupeň automatizácie — čo vedie ku komplikáciám. Nehovoriac o tom, že takýto prístup je časovo a aj finančne veľmi náročný. Druhý prístup vychádza z analýzy a identifikácie veľkého množstva nameraných procesných údajov, čo vedie k dátovým modelom. Dátové modely sú jednoduchšie na konštrukciu, avšak môžu so sebou prinášať neistoty v podobe nesprávnej štruktúry modelu alebo parametrov. Tieto neistoty sú najčastejšie spôsobené vplyvom chyby merania [30].

Existuje viacero metód, ktoré dokážu spracovať zašumený signál, a každá z nich so sebou nesie určité nevýhody. Napríklad metóda najmenších štvorcov predpokladá, že šum merania má normálne rozdelenie a ak tento predpoklad nie je dodržaný, môže viesť k nesprávnym výsledkom [21].

Garantovaný odhad parametrov (GOP) je metóda, ktorá obchádza problém poznania

rozdelenia náhodných veličín a namiesto toho predpokladá ľubovoľnú ale ohraničenú chybu merania. Výsledkom identifikácie pomocou GOP sú intervalové odhady parametrov modelu, ktoré zabezpečia, že nameraný výstup procesu sa bude nachádzať v rozmedzí stanovenej chyby merania [25].

Tu sa ponúka otázka, či by nebolo možné opísať komplikované zariadenie jednoduchším mechanistickým modelom a vzniknuté rozdiely od skutočného zariadenia doplniť dátovými modelmi. Ako bolo ukázané vo viacerých vedeckých publikáciách, takéto hybridné modely je možné skonštruovať a využiť ich v rôznych oblastiach automatizácie [11, 13].

Hlavným predmetom tejto práce je ukázať ako možno skonštruovať hybridný model využitím metódy garantovaného odhadu parametrov a aplikovať ho pri ekonomickej optimalizácii dynamického procesu prietokového biochemického reaktora. Pomocou metódy GOP identifikujeme dátové časti hybridných modelov, ktoré budú dopĺňať rozdiely v koncentrácii substrátu alebo biomasy medzi zariadením a nepresným mechanistickým modelom.

Biochemické reaktory sa považujú za dôležitú súčasť chemického priemyslu. Široká škála dôležitých zlúčenín ako farmaceutické produkty, rôzne polyméry alebo produkty potravinárskeho priemyslu sa vyrábajú pomocou určitého fermentačného média (rôzne baktérie, kvasinky, vlákňité huby alebo enzýmy) za prísne stanovených podmienok v biochemickom reaktore [31]. Na druhej strane, biochemické reaktory vykazujú širokú škálu dynamického správania a ponúkajú veľa problémov s modelovaním v dôsledku prítomnosti živých organizmov, ktorých rýchlosť rastu je opísaná komplexnými kinetickými výrazmi [27]. Z týchto dôvodov predstavujú biochemické reaktory zaujímavú oblasť na štúdium.

Diplomová práca je rozčlenená na dve väčšie kapitoly — garantovaný odhad parametrov a hybridné modelovanie a jeho využitie v praxi. Prvá časť sa zaoberá problematikou identifikácie dátových modelov pomocou tejto metódy. Dôkladne sme rozobrali identifikáciu FIR a ARX modelov a na konci kapitoly sme uviedli aj praktické ukážky. V ďalšej kapitole sme zhrnuli informácie ohľadom hybridných modelov a ich aplikácii pri optimalizácii dynamických systémov. Posledná časť kapitoly hybridného modelovania sa venuje problematike optimalizácie prietokového biochemického reaktora. Jej výsledky sme uviedli v poslednej kapitole.

Časť I

Dátové modelovanie a
Garantovaný odhad
parametrov

Dátové modelovanie

V dnešnom svete sme doslova obklopený množstvom dát, ktoré vychádzajú z rôznych zariadení. Tieto dáta sa dajú použiť rôzne — štúdium procesov (Čo sa stalo v danom okamihu?), predikcia udalostí (Čo sa môže stať?), a aj reakcia na ne (Čo môžeme spraviť?). Týmto otázkami sa zaoberá dátové modelovanie. Vo všeobecnosti by sa dalo povedať, že úlohou dátového modelovania je nájsť vzorec medzi závislou (vstupnou) a nezávislou (výstupnou) premennou, ktorý je skrytý v súbore dát — extrahuje model z údajov bez akýchkoľvek predpokladov na funkčnosť, čím sa môže stratiť určitá miera interpretovateľnosti modelu, ale vo všeobecnosti sa uľahčí prístup k matematickému modelovaniu [23].

Raz uviedol známy matematik a štatistik George E.P. Box v jednej z jeho publikácii nasledovný citát: “*Všetky modely sú nesprávne, ale niektoré sú užitočné.*” [6]. Nejde iba o slaboduchú dehonestáciu dátového modelovania. Týmto citátom chcel vyjadriť skutočnosť, že samotné modely, už z definície, sú iba aproximáciami neznámej reality — neexistuje žiaden pravý model, ktorý by dokázal perfektne reflektovať skutočnosť. Okrem toho kvalita modelu závisí od veľkosti vzorky dát – menšie efekty je možné odhaliť iba pri zväčšovaní veľkosti vzorky. Množstvo informácií vo veľkých súboroch údajov výrazne prevyšuje informácie v malých vzorkách dát [7]. Toto je daň, ktorú platíme za “jednoduchosť” dátového modelovania.

1.1 Dátové modely

V tejto časti si uvedieme niektoré základné formulácie modelov lineárnych dynamických systémov v diskretnom čase, ktoré sa najčastejšie používajú pri identifikácii nameraných údajov. Najskôr je však nutné zaviesť pojem ARMA proces, na základe ktorého môžeme vyjadriť ľubovoľný stacionárny náhodný signál ako biely šum prechádzajúci lineárnym systémom [10].

ARMA proces

Uvažujme proces $y(t)$, ktorý môže byť reprezentovaný ako biely šum $e(t)$ prechádzajúci lineárnym systémom v tvare

$$y(t) = F(q)e(t), \quad (1.1)$$

kde q je operátor posunutia a $F(q)$ je racionálna lomená funkcia v tvare

$$F(q) = \frac{C(q)}{A(q)} = \frac{1 + \sum_{i=1}^{n_c} c_i q^{-i}}{1 + \sum_{i=1}^{n_a} a_i q^{-i}}, \quad (1.2)$$

kde n_c resp. n_a predstavuje rád čitateľa resp. rád menovateľa. Pri takejto formulácii, ARMA proces vyzerá nasledovne

$$y(t) = -a_1 y(t-1) - \dots - a_{n_a} y(t-n_a) + e(t) + c_1 e(t-1) + \dots + c_{n_c} e(t-n_c). \quad (1.3)$$

Skladá sa z dvoch častí — AR (autoregressive), keď $n_c = 0$

$$y(t) + a_1 y(t-1) + \dots + a_{n_a} y(t-n_a) = e(t) \quad (1.4)$$

a z časti MA (moving average), keď $n_a = 0$

$$y(t) = e(t) + c_1 e(t-1) + \dots + c_{n_c} e(t-n_c). \quad (1.5)$$

Zatiaľ čo AR opisuje dynamiku výstupu $y(t)$, zložka MA modeluje vplyv poruchovej veličiny $e(t)$.

ARX model

ARX (Autoregressive with eXogenous variable) model predpokladá, že skutočný dynamický systém je popísaný diferenčnou rovnicou v tvare

$$y(t) = \frac{B(q)}{A(q)} u(t) = \frac{\sum_{i=1}^{n_b} b_i q^{-i}}{1 + \sum_{i=1}^{n_a} a_i q^{-i}} u(t), \quad (1.6)$$

čo môžeme prepísať do tvaru

$$y(t) = -a_1 y(t-1) - \dots - a_{n_a} y(t-n_a) + b_1 u(t-1) + \dots + b_{n_b} u(t-n_b) + e(t), \quad (1.7)$$

kde $y(t)$ sú výstupy modelu a $u(t)$ sú jeho vstupy. ARX model predpokladá, že chyba vstupuje do rovnice systému v podobe bieleho šumu $e(t)$.

FIR model

FIR (Finite Impulse Response) je špeciálny prípad ARX modelu právetedy, ak rád

menovateľa $n_a = 0$. Takýto model je závislý iba od vstupov a môžeme ho opísať diferenčnou rovnicou v tvare

$$\begin{aligned} y(t) &= B(q)u(t) = \sum_{i=1}^{n_b} b_i q^{-i} u(t) = \\ &= b_1 u(t-1) + \dots + b_{n_b} u(t-n_b). \end{aligned} \quad (1.8)$$

ARMAX model

Ide o modifikovaný ARX model, kde sa predpokladá, že chyba vstupuje ako MA model. Výsledný tvar je nasledovný

$$\begin{aligned} y(t) &= -a_1 y(t-1) - \dots - a_{n_a} y(t-n_a) + \\ &+ b_1 u(t-1) + \dots + b_{n_b} u(t-n_b) + \\ &+ e(t) + c_1 e(t-1) + \dots + c_{n_c} e(t-n_c). \end{aligned} \quad (1.9)$$

OE model

Ďalším modelom v tejto sérii je OE model, teda “Output Error” resp. “Chyba na Výstupe”. Jeho štruktúra je podobná s ARX model, avšak s tým rozdielom, že OE model obsahuje vnútornú premennú $w(t)$, ktorá nie je priamo pozorovateľná a preto sa musí odhadovať

$$\begin{aligned} w(t) &= -g_1 w(t-1) - \dots - g_{n_g} w(t-n_g) + \\ &+ b_1 u(t-1) + \dots + b_{n_b} u(t-n_b), \\ y(t) &= w(t) + e(t). \end{aligned} \quad (1.10)$$

Box-Jenkinsov model

Všeobecnejšia forma OE modelu predstavuje Box-Jenkinsov model, kde šum na výstupe je modelovaný ako ARMA proces

$$y(t) = \frac{B(q)}{G(q)} u(t) + \frac{C(q)}{D(q)} e(t). \quad (1.11)$$

Všeobecný model

Predstavuje najviac zovšeobecnenú formu, ktorá je vyhovujúca pre všetky uvedené modely

$$A(q)y(t) = \frac{B(q)}{G(q)} u(t) + \frac{C(q)}{D(q)} e(t). \quad (1.12)$$

1.2 Odhad parametrov

Podobne dôležitá ako samotná štruktúra resp. voľba dátového modelu, je aj odhad jeho parametrov. V tejto časti spomenieme niektoré z najviac využívaných metód na identifikáciu či už statických alebo dynamických modelov.

Skôr ako začneme rozoberať samotné metódy, je potrebné spomenúť základné požiadavky na odhad parametrov [4], ktoré by mala každá dobrá metóda spĺňať. Tieto požiadavky tvoria súhrn štatistických vlastností, ktoré chceme, aby daná metóda mala, pretože vedú k správnemu, možno by bolo lepšie povedať k optimálnemu, odhadu parametrov.

1.2.1 Požiadavky na odhad parametrov

Majme vektor $\hat{\theta}$, ktorý predstavuje vektor odhadnutých parametrov θ , potom:

nevychýlenosť odhadu definujeme ako

$$E \left\{ \hat{\theta}^k \right\} = \theta,$$

čo znamená, že ak odhad parametrov uskutočníme na základe k meraní, potom pre každé meranie k musí platiť, že stredná hodnota odhadnutých parametrov $E \left\{ \hat{\theta}^k \right\}$ sa rovná ich skutočným hodnotám θ .

konzistencia znamená, že pre ľubovoľný vektor konštant $\delta > 0$ platí

$$\lim_{k \rightarrow \infty} P \left(\left| \hat{\theta}^k - \theta \right| < \delta \right) = 1.$$

Táto definícia v podstate tvrdí, že so zväčšujúcim sa počtom dát, by sa odhad parametrov mal zlepšovať resp. by sa mal blížiť ku skutočným hodnotám (pravdepodobnosť, že absolútna hodnota rozdielu odhadovaných a skutočných parametrov $P \left(\left| \hat{\theta}^k - \theta \right| \right)$ bude ležať v ľubovoľnom δ okolí, bude mať hodnotu istého javu).

výdatnosť, t.j., ak medzi odhadom $\hat{\theta}$ a ľubovoľným ďalším odhadom $\tilde{\theta}$ platí

$$\text{Cov}(\tilde{\theta}) - \text{Cov}(\hat{\theta}) \geq 0,$$

teda optimálny odhad je ten, ktorý má minimálnu disperziu resp. kovarianciu $\text{Cov}()$ (v skalárnom prípade). Pri nulovej disperzii prechádza pravdepodobnosť v istotu. Výdatnosť sa v literatúre môže označovať taktiež ako efektívnosť [4].

1.2.2 Metódy statickej identifikácie

Metóda najmenších štvorcov

Jednou z najpoužívanějších metód, ktorú vynášiel Gauss pri výpočte obežných dráh komét a planét z nameraných údajov, je metóda najmenších štvorcov [14]. Princíp tejto metódy je založený na hľadaní takej kombinácie parametrov systému, ktorá minimalizuje vzdialenosť medzi nameranými a odhadnutými údajmi. Treba zdôrazniť, že táto metóda vyžaduje, aby parametre modelu boli v lineárnom vzťahu k vstupom.

Začnime nasledovne. Majme systém $F(\theta, x)$, ktorý je funkciou vstupov modelu x a parametrov θ . Výstup y z takéhoto systému, ktorý je zaťažený chybou merania e , je

$$y = \theta^T x + e = \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \cdots + \theta_k x_k + e. \quad (1.13)$$

Pokúsme sa nájsť, takú hodnotu parametrov $\hat{\theta}$, ktorá by minimalizovala súčet druhých mocnín odchýliek nameraných údajov od modelových výstupov ako

$$J(\theta) = \sum_{i=1}^k e_i^2 = \sum_{i=1}^k (y_i - \theta^T x_i)^2. \quad (1.14)$$

Túto rovnicu môžeme napísať vo vektorovom tvare

$$J(\theta) = (Y - X\theta)^T (Y - X\theta). \quad (1.15)$$

Formálne sa rovnica nezmenila, iba sme zadefinovali dva nové vektory

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_k \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} x_1^T \\ x_2^T \\ \vdots \\ x_k^T \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

Podmienku minima zabezpečíme z nulovej hodnoty gradientu funkcie $J(\theta)$ podľa θ .

$$\nabla J(\theta) = \frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta} = -X^T Y + X^T X \hat{\theta} = 0. \quad (1.17)$$

Z toho jasne vyplýva, že ak existuje inverzia výrazu $X^T X$, vektor odhadovaných parametrov získame ako

$$\hat{\theta} = (X^T X)^{-1} X^T Y. \quad (1.18)$$

Bez dôkazu uvádzame, že metóda najmenších štvorcov spĺňa všetky požiadavky na odhad parametrov [10].

Modifikovaná metóda najmenších štvorcov

V prípade, že náhodný šum e je korelovaný a poznáme jeho kovariančnú maticu Σ , môžeme prepísať kritérium minimalizácie do tvaru

$$J(\theta) = (Y - X\theta)^T \Sigma^{-1} (Y - X\theta). \quad (1.19)$$

Ak uvažujeme stochastický proces, potom najlepší nevychýlený odhad parametrov $\hat{\theta}$ získame ako

$$\hat{\theta} = (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} Y. \quad (1.20)$$

Takúto modifikáciu metódy najmenších štvorcov používame najmä vtedy, ak sa v meraní vyskytujú systematické chyby, zaznamenávanie nameraných údajov má časové oneskorenie, disponujeme nesprávnym modelom, zvolili sme nesprávne vstupné veličiny alebo namerané dáta boli nejakým spôsobom filtrované alebo extrapolované [10].

Formulácia vhodnej optimalizačnej úlohy

Metóda najmenších štvorcov, napriek tomu ako veľmi elegantne si dokáže poradiť s odhadom parametrov, má jednu veľkú nevýhodu. Parametre modelu musia byť v lineárnom vzťahu ku vstupom, pričom samotné vstupy môžu predstavovať ľubovoľné lineárne aj nelineárne funkcie. Týmto sa eliminuje značná časť problematik, ktoré jednoducho nedokáže vyriešiť.

Ukazuje sa, že vhodným definovaním optimalizačného problému, dokážeme spomenutý problém obísť a nie len to. Takýto prístup nám umožňuje odhadovať parametre dynamických systémov, teda diferenciálnych alebo diferenčných rovníc [34].

Majme ľubovoľnú diferenciálnu rovnicu

$$\dot{x}(t) = f(t, x(t), \theta), \quad (1.21)$$

a súbor nameraných údajov $y = [y_1, y_2, \dots, y_N]$ z daného dynamického systému. Budeme hľadať takú kombináciu parametrov $\hat{\theta}$, ktorá minimalizuje sumu kvadrátov rozdielu nameraných a modelových údajov. Odhad parametrov potom získame ako

$$\begin{aligned} \hat{\theta} = \arg \min_{\theta} \quad & \sum_{i=1}^N (y_i - x(t_i))^2. \\ \text{s.t.} \quad & \dot{x}(t) = f(t, x(t), \theta) \\ & x(0) = x_0 \end{aligned} \quad (1.22)$$

Ako si môžeme všimnúť, účelová funkcia takto zadaného optimalizačného úloh a metódy najmenších štvorcov je totožná. Rozdiel je v tom, že zatiaľ čo pri metóde najmenších štvorcov sme boli schopní nájsť analytické riešenie, v tomto prípade je nutné riešiť danú optimalizačnú úlohu numericky a takýto prístup k odhadu parametrov je výpočtovo náročnejší.

Garantovaný odhad parametrov

V predošlej časti sme spomenuli niekoľko metód na odhad parametrov a každá si so sebou nesie určité nároky na namerané údaje. Napríklad taká metóda najmenších štvorcov predpokladá, že šum merania má normálne rozdelenie. Čo sa stane, ak tento predpoklad alebo ďalšie, ktoré sme uviedli v časti “Požiadavky na odhad parametrov”, nebude dodržaný? Je zrejmé, že to povedie k nesprávnym výsledkom.

Zostáva tu však ešte jeden problém, ktorý je omnoho zložitejší ako samotný odhad parametrov, a tým je voľba štruktúry dátového modelu. Pomocou metódy najmenších štvorcov môžeme odhadovať parametre modelu ľubovoľnej štruktúry, v prípade že je zabezpečená linearita. Ale ako zistíme, či daný model nezanedbáva dôležitú časť dynamiky procesu alebo na druhej strane, či už neaproximuje šum merania? Riešenie môže ponúknuť práve metóda garantovaného odhadu parametrov.

Garantovaný odhad parametrov (GOP) je metóda, ktorá obchádza problém poznania rozdelenia náhodných veličín a namiesto toho predpokladá ľubovoľnú ale ohraničenú chybu merania. Výsledkom identifikácie pomocou GOP sú intervalové odhady parametrov modelu, ktoré zabezpečia, že nameraný výstup procesu sa bude nachádzať v rozmedzí stanovenej chyby merania [25]. Demonstrujme si fungovanie tejto metódy na nasledujúcom príklade.

2.1 Grafická ilustrácia GOP

Predstavme si, že sme získali vstupné u a výstupné y údaje z procesu, ktoré v tomto prípade budú predstavovať konštantnú funkciu, tak ako to je zobrazené na Obr. 2.1a. Vieme, že senzor má stanovený rozsah chyby merania e . Štruktúru modelu procesu, z ktorého sme získali údaje, nepoznáme a preto sa na základe zobrazenia nameraných

dát rozhodneme, že budeme tieto údaje aproximovať lineárnym modelom

$$\hat{y}(u) = \theta_1 + \theta_2 u. \quad (2.1)$$

Jediné neznáme v tomto modeli sú parametre θ_1 a θ_2 . Na ich identifikáciu využijeme grafickú metódu GOP a začneme tým, že si vyjadríme parameter θ_2 ako funkciu nameraných údajov y, u a parametra θ_1

$$\theta_2 = \frac{1}{u}y - \frac{1}{u}\theta_1, \quad (2.2)$$

kde θ_2 teraz predstavuje nezávislú premennú a θ_1 závislú. Cieľom odhadu parametrov bude, aby ich vzájomná kombinácia viedla k výstupným údajom modelu $\hat{y}(u)$, ktoré budú ležať v rozmedzí hraníc chyby merania senzora. Táto podmienka upravuje rovnicu 2.2 do tvaru

$$\theta_2 = \frac{1}{u}(y \pm e) - \frac{1}{u}\theta_1, \quad (2.3)$$

ktorú môžeme formálne rozpísať na dve rovnice

$$\theta_2^{(1)} = \frac{1}{u}(y + e) - \frac{1}{u}\theta_1, \quad (2.4)$$

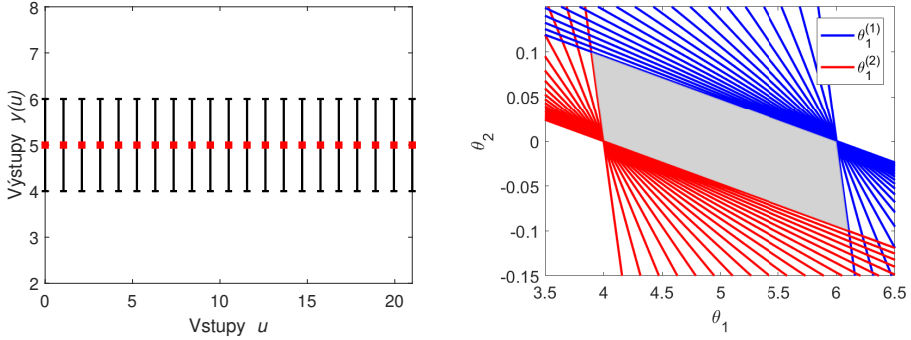
$$\theta_2^{(2)} = \frac{1}{u}(y - e) - \frac{1}{u}\theta_1. \quad (2.5)$$

Tieto priamky vytyčujú oblasť vhodných kombinácií parametrov modelu θ_1, θ_2 ktorými môžeme opísať dané dáta a garantuje, že správne riešenie leží niekde vo vnútri tejto oblasti, presne ako môžeme vidieť na Obr. 2.1b. Modrou farbou sú znázornené priamky definované rovnicou (2.4) a červenou priamky dané (2.5). Garantovaná oblasť všetkých možných hodnôt parametrov je vyplnená šedou farbou. Z tohto obrázka je jasne vidieť, že parameter θ_1 (úsek) môže nadobúdať iba hodnoty z intervalu $[4; 6.1]$ a parameter θ_2 (smernica) z intervalu $[-0.1; 0.1]$.

Takto sme získali nielen informácie o parametroch nášho modelu, ale aj informácie o zložitosti resp. jednoduchosti štruktúry modelu. Na Obr. 2.1b vidíme, že parameter θ_2 obsahuje vo svojom intervale nulu, čím sa porušuje invariantnosť štruktúry modelu a môžeme tvrdiť, že takýto matematický opis je potenciálne zbytočne zložitý. Rovnaké dáta by sme teda vedeli opísať aj konštantným modelom, t.j.

$$\hat{y}(u) = \theta_1. \quad (2.6)$$

Avšak dáta zobrazené na Obr. 2.1 boli trochu zidealizované a pravdepodobne v bežnom živote by nenastala situácia, že by senzor niekoľkokrát po sebe nameral tú istú hodnotu.



(a) Namerané výstupné údaje z neznámeho procesu. (b) Grafická metóda garantovaného odhadu parametrov.

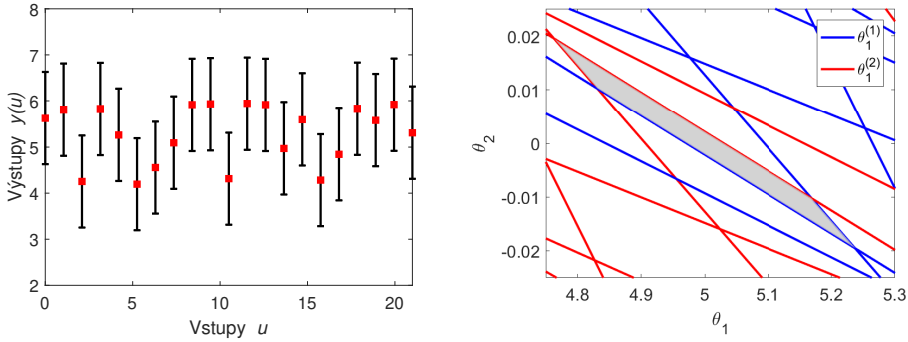
Obr. 2.1: Ilustračný príklad garantovaného odhadu parametrov — variant 1 — zidealizovaný prípad.

Pozrime sa však, čo sa stane, ak naše namerané údaje budú mať bližšie k realite, tak ako je uvedené na Obr. 2.2a. Ako si môžeme všimnúť na Obr. 2.2b, odhadované ohraničenie jednotlivých parametrov θ_1, θ_2 sa nám výrazne zmenšilo. Takže môžeme tvrdiť, že samotný šum merania nám prispieva k presnosti odhadu parametrov.

2.2 Mnohorozmerový prípad

Grafická metóda GOP je krásny ilustračný príklad toho ako táto metóda funguje. Problémom však ostáva, že ak by sme potrebovali odhadovať viac parametrov ako 3 (pri bežných regresných analýzach dátových modelov potrebujeme odhadovať desiatky, možno až stovky parametrov), narážame na obmedzenia tejto metódy — problém s vizualizáciou. Preto je nutné túto grafickú metódu vymeniť za niečo iné, čo bude obchádzať problematiku s vizualizáciou. Schodnou cestou je transformovať úlohu GOP na optimalizačnú problematiku [2], ktorý by mohla vyzeráť nasledovne

$$\begin{aligned}
 [\theta_i, \bar{\theta}_i] &= \min_{\theta} / \max_{\theta} \theta_i, & \forall i = 1, 2, \dots, n_{\theta}, \\
 \text{s.t.} \quad & \underline{e} \leq y - \hat{y}(\theta) \leq \bar{e}
 \end{aligned} \tag{2.7}$$



(a) Namerané výstupné údaje z neznámeho (b) Grafická metóda garantovaného odhadu procesu.

Obr. 2.2: Ilustračný príklad garantovaného odhadu parametrov — variant 2.

kde

$$\theta = \begin{pmatrix} \underline{\theta}_1 & \bar{\theta}_1 \\ \underline{\theta}_2 & \bar{\theta}_2 \\ \vdots & \vdots \\ \underline{\theta}_{n_\theta} & \bar{\theta}_{n_\theta} \end{pmatrix}.$$

Takto hľadáme minimálnu $\underline{\theta}_i$ resp. maximálnu $\bar{\theta}_i$ hodnotu všetkých n_θ odhadovaných parametrov, ktoré nám zaručia, že rozdiel výstupov nameraných y a modelových $\hat{y}$ bude ležať v hraniciach chyby merania $\langle \underline{e}, \bar{e} \rangle$.

2.3 Odhad rádu modelu

V predchádzajúcej časti sme ukázali ako získať intervalové hodnoty parametrov pre ľubovoľný počet odhadovaných parametrov. Čo sme však zamlčali bolo, že nie každá štruktúra modelu dokáže splniť podmienku optimalizačnej úlohy (2.7). Preto, skôr ako začneme riešiť úlohu odhadu parametrov, potrebujeme odhadnúť vhodnú štruktúru resp. rád modelu. V tejto časti uvidíme ako riešiť problematiku odhadu minimálneho rádu modelu. Úlohu hľadania adekvátneho maximálneho rádu modelu objasníme v časti “Verifikácia dátových modelov”.

Ak nájdeme najjednoduchšiu štruktúru dátového modelu, ktorá vyhovuje optimalizačnej

úlohe definovanej v nasledujúcom tvare

$$\begin{aligned} \min_{\theta} \quad & 0, \\ \text{s.t.} \quad & \underline{e} \leq y - \hat{y}(\theta) \leq \bar{e} \end{aligned} \tag{2.8}$$

potom sme našli minimálny rád modelu. $\theta^T = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n_\theta})$ je vektor odhadovaných parametrov a n_θ predstavuje odhadovaný minimálny rád modelu. Takáto formulácia rieši problematiku prípustnosti, ktorej cieľom je nájsť najjednoduchšiu štruktúru dátového modelu, pri ľubovoľných hodnotách parametrov θ , ktorá neporušuje ohraničenia optimalizačného problému.

2.4 Verifikácia dátových modelov

Úlohou verifikácie dátových modelov je overiť správnosť a posúdiť kvalitu daného dátového modelu spomedzi viacerých možností. Existuje množstvo metód a prístupov, ktoré sa snažia riešiť danú problematiku. My spomedzi nich spomenieme tzv. štandardné kritéria a zobrazenie Pareto front.

2.4.1 Štandardné kritéria

Pre štandardné kritéria je základným elementom výberu vhodného modelu zložitost modelu. Tieto kritéria penalizujú pravdepodobnosť na základe počtu parametrov resp. rádu modelu a veľkosti vzorky. Akaike, v roku 1974, navrhol použitie Kullback–Leibler informačnej hodnoty na výber modelov, ktorým sa ustanovil vzťah medzi informovanosťou, pravdepodobnosťou a Kullback–Leibler maximom. Až neskôr, keď sa stanovil vzťah na odhad Kullback–Leibler informačnej hodnoty, ju začali nazývať “Akaike information criterion (AIC)” alebo Akaikeho informačné kritérium [9].

Postupom času pribúdali ďalšie informačné kritéria, ktoré nejakým spôsobom modifikovali AIC. Medzi ne patria AIC s korekciou, ktoré sa zvykne označovať ako “AICc” a taktiež Bayesovské informačné kritérium “BIC”. Pri aplikácii týchto kritérií na sadu požadovaných modelov, najlepším modelom je ten, ktorý má najnižšiu hodnotu AIC, AICc alebo BIC.

AIC

Toto kritérium je založené na koncepte informácie a poskytuje relatívnu mieru strategických informácií, keď sa konkrétny model používa na opis skutočného javu [9]. Akaikeho kritérium možno vyjadriť nasledovne

$$\text{AIC} = 2k - 2 \ln \left(\hat{L} \right), \quad (2.9)$$

kde k reprezentuje počet parametrov modelu a $\hat{L}$ je pravdepodobnostná funkcia, ktorá vyjadruje mieru správnosti regresie dát daným modelom. Jednou z takýchto funkcií je aj funkcia hustoty pravdepodobnosti normálneho rozdelenia, ktorej tvar je

$$\hat{L} = \prod_i^N \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{y_i - \hat{y}_i}{\sigma} \right)^2}, \quad (2.10)$$

kde σ je jeho štandardná odchýlka a rozptyl sa označuje ako σ^2 .

AICc

Nevýhodou AIC je, že môže nepresne vyhodnotiť kvalitu modelu v prípade, že počet parametrov je väčší ako veľkosť vzorky [9]. Vtedy je nutné upraviť dané kritérium

$$\text{AICc} = \text{AIC} + \frac{2k^2 + 2k}{N - k - 1}, \quad (2.11)$$

kde N predstavuje veľkosť vzorky dát. AICc by sa malo používať, ak pomer $\frac{n}{k}$ je malý, napríklad $\frac{N}{k} < 40$ [7]. V opačnom prípade, keď je tento pomer dostatočne veľký, obe informačné kritéria by mali vracaať podobné výsledky.

BIC

Bayesovské informačné kritérium slúži na hodnotenie kvality modelu, ktoré je založené na posteriornej pravdepodobnosti porovnávaných modelov [9] a definujú dané informačné kritérium ako

$$\text{BIC} = \ln(N) k - 2 \ln \left(\hat{L} \right). \quad (2.12)$$

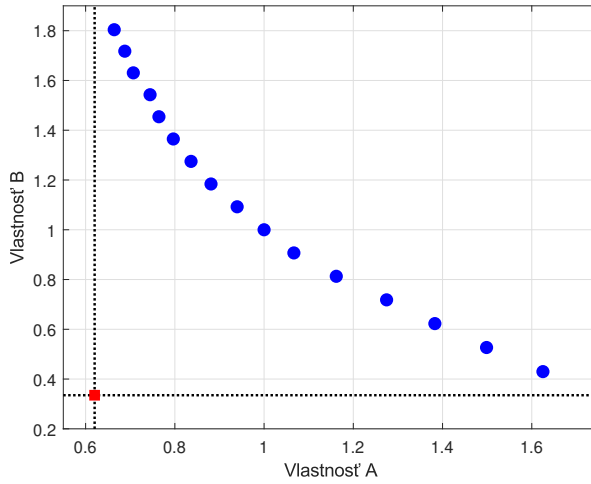
2.4.2 Pareto front

Táto metóda je pomenovaná po talianskom inžinierovi, sociológovi, ekonómovi, politickom vedcovi a filozofovi Vilfredovi Paretovi. On si ako prvý uvedomil, že veľa ekonomických riešení pomáhajú určitej skupine ľudí, zatiaľ čo inej ubližujú. Jeho prácou sa snažil nájsť také riešenie, ktoré by na jednej strane pomáhalo a na druhej neubližovalo [24].

Problematiku, ktorú riešil Pareto, bola viacúčelová optimalizácia. Pri tomto druhu optimalizácie, kedy rôzne účely (účelové funkcie) sú si odporujúce, najlepšie riešenie nájdeme ako kompromis, pretože nie je možné spraviť zlepšenie v jednom smere bez toho, aby nedošlo k degradácii ostatných. Súbor všetkých Pareto-optimálnych riešení sa nazýva Pareto front, pretože zvyčajne graficky tvorí zreteľný front bodov.

Jednu ukážku Pareto frontu môžeme vidieť na Obr. 2.3. Modrou sú zobrazené možné optimálne riešenia a červená predstavuje utopický bod – tento nie je možné nikdy dosiahnuť a predstavuje to najlepšie možné riešenie. Ako sa čítajú takéto grafy? V prvom rade je nutné si uvedomiť, ako sú kvantifikované dané vlastnosti A, B. Povedzme, že väčšia hodnota znamená zhoršenie danej vlastnosti. Ako sa tak pohybujeme po horizontálnej osi, zlepšujeme vlastnosť A, ale pritom zhoršujeme vlastnosť B. Mohli by sme povedať, že bod, ktorý je najbližšie k utopickému bodu, bude predstavovať najlepší možný kompromis medzi oboma vlastnosťami. Takýto predpoklad je správny, ale veľa závisí od profilu frontu. Na Pareto front sa môžeme pozerieť ešte inak. Rozdelíme front na dve časti v bode, kde sa výraznejšie mení sklon frontu, napr. keď vlastnosť B dosahuje hodnotu 1. Do tohto bodu, každé výraznejšie zlepšenie vo vlastnosti A, predstavuje menšiu degradáciu vlastnosti B, čo je pre nás výhodnejšie. Avšak, od tohto bodu sa sklon frontu mení a ďalším zlepšovaním vlastnosti A, ktoré by bolo v tom prípade omnoho menšie, by sme výraznejšie zhoršovali vlastnosť B a to by bolo kontraproduktívne.

Pareto front môžeme využiť aj pri verifikácii kvality dátových modelov. Stačí ak zobrazíme niektoré skúmané vlastnosti vybraného súboru modelov, napríklad trénovacia vs. predikčná kvalita modelu, ktoré sa snažíme zlepšiť, optimalizovať. A na základe predchádzajúcej úvahy vyberieme taký model, ktorý bude predstavovať ten najlepší možný kompromis medzi oboma vlastnosťami.



Obr. 2.3: Zobrazenie Pareto front – optimálne riešenia (modrá), utopický bod (červená).

2.5 Identifikácia FIR modelu

Doteraz sme načrtli situáciu, ako by sme mohli využiť metódu garantovaného odhadu na určenie minimálnej štruktúry modelu a odhad jeho parametrov. Poďme si teraz ukázať ako by sme túto metódu mohli aplikovať na niektorých dátových dynamických modeloch a začneme s FIR modelom.

Najskôr si pripomenieme štruktúru FIR modelu. Ako uvádza rovnica 1.8, FIR model má nasledovný tvar

$$\hat{y}(t) = \sum_{i=1}^{n_b} b_i u(t-i) = b_1 u(t-1) + b_2 u(t-2) + \dots + b_{n_b} u(t-n_b),$$

kde n_b predstavuje rád modelu, resp. počet parametrov b .

Aby sme mohli odhadnúť parametre takéhoto modelu, potrebujeme najskôr poznať jeho štruktúru. Na to využijeme metódu odhadu minimálneho rádu modelu, ktorú sme zadefinovali ako 2.8. V tomto prípade musíme danú formuláciu upraviť do tvaru

$$\begin{aligned} \min_{B \in [b_1, b_2, \dots, b_{n_b}]} & 0, \\ \text{s.t.} \quad & \underline{e} \leq y - \hat{y} \leq \bar{e} \end{aligned} \tag{2.13}$$

ktorá nám vráti hodnotu minimálneho rádu FIR modelu n_b . V tomto momente už máme k dispozícii informáciu o vyhovujúcej štruktúre modelu, ktorá vyhovuje podmienke GOP. Nasleduje odhad intervalových hodnôt parametrov. Tie získame modifikáciou rovnice 2.7

$$\begin{aligned} [b_i, \bar{b}_i] &= \min_{B \in [\underline{b}, \bar{b}]} / \max_{B \in [\underline{b}, \bar{b}]} b_i, \\ \text{s.t. } \underline{e} &\leq y - \hat{y} \leq \bar{e} \end{aligned} \quad (2.14)$$

pre všetky $i = 1, 2, \dots, n_b$.

Týmto sme ukončili identifikáciu FIR modelu minimálneho rádu a v ďalšom postupe by sme sa mali venovať overovaniu správnosti a posudzovaniu kvality daného modelu a modelov vyššieho rádu.

2.6 Identifikácia ARX modelu

ARX model, ako opisuje rovnica 1.7, má štruktúru doplnenú o člen $A(q)$ oproti FIR modelu a má tvar

$$\begin{aligned} \hat{y}(t) &= \frac{\sum_{i=1}^{n_b} b_i u(t-i)}{1 + \sum_{i=1}^{n_a} a_i q^{-i}} = \\ &= -a_1 \hat{y}(t-1) - \dots - a_{n_a} \hat{y}(t-n_a) + b_1 u(t-1) + \dots + b_{n_b} u(t-n_b). \end{aligned}$$

Výhodou ARX modelu je, že dokáže drasticky znížiť počet parametrov oproti FIR modelu, kvôli príspevku minulých výstupov $\hat{y}(t-i)$. Avšak, v porovnaní s identifikáciou FIR modelu, je identifikácia ARX modelu omnoho zložitejšia problematika. Práve príspevok minulých výstupov nám transformuje optimalizačnú úlohu z jednoduchšej lineárnej (ako to bolo pri identifikácii FIR modelu) na zložitú nelineárnu. V každom prípade postup identifikácie ostáva rovnaký. Najskôr určíme minimálnu štruktúru ARX modelu, ktorá spĺňa podmienky GOP a v ďalšom kroku odhadneme jej parametre resp. intervalové hodnoty parametrov.

Minimálnu štruktúru ARX modelu, teda rád čitateľa n_b a rád menovateľa n_a , nájdeme ako riešenie danej optimalizačnej úlohy

$$\begin{aligned} \min_{a_1, \dots, a_{n_a}, b_1, \dots, b_{n_b}, \hat{y}(t)} & \quad 0. \\ \text{s.t.} & \quad \underline{e} \leq y - \hat{y} \leq \bar{e} \\ & \quad \hat{y}(0) = \hat{y}_0 \end{aligned} \quad (2.15)$$

A odhad intervalových hodnôt parametrov určíme ako

$$\begin{aligned} [\underline{\theta}_i, \bar{\theta}_i] &= \min_{\Theta \in [\underline{\theta}, \bar{\theta}]} / \max_{\Theta \in [\underline{\theta}, \bar{\theta}]} \theta_i, \\ \text{s.t.} \quad &\underline{e} \leq y - \hat{y} \leq \bar{e} \\ &\hat{y}(0) = \hat{y}_0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

pre všetky $i = 1, 2, \dots, n_a + n_b$ a Θ predstavuje vektor minimálnych a maximálnych hodnôt parametrov a, b

$$\Theta = \begin{pmatrix} \underline{a}_1 & \bar{a}_1 \\ \underline{a}_2 & \bar{a}_2 \\ \vdots & \vdots \\ \underline{a}_{n_a} & \bar{a}_{n_a} \\ \underline{b}_1 & \bar{b}_1 \\ \underline{b}_2 & \bar{b}_2 \\ \vdots & \vdots \\ \underline{b}_{n_b} & \bar{b}_{n_b} \end{pmatrix}.$$

Zložitosť týchto optimalizačných úloh je pravdepodobne očividná, ale pre rozumné rády modelov, táto optimalizácia nemusí byť nutne náročná. Rozdiel v identifikácii ARX modelu spočíva v tom, že musíme v každom nameranom bode odhadovať hodnotu $\hat{y}(t)$, čo nám pridáva na počte odhadovaných parametrov.

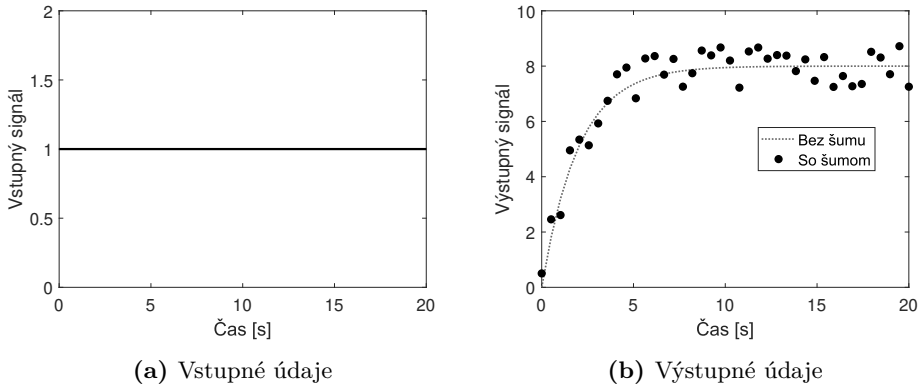
2.7 Príklady identifikácie

V tejto časti si na konkrétnom príklade ukážeme identifikáciu FIR aj ARX modelu. Začnime tým, že si zadefinujeme problematiku. Predstavme si, že sme z neznámeho procesu získali údaje o vstupoch a výstupoch, tak ako je znázornené na Obr. 2.4, ktoré sú v skutočnosti opísané prenosovou funkciou 1. rádu so zosilnením $K = 8$ a časovou konštantou $T = 2$

$$G(s) = \frac{K}{Ts + 1} = \frac{8}{2s + 1}.$$

Tak ako všetky reálne dáta, výstupné údaje sú zafaržené šumom, a presnosť merania senzora je $e = \pm 0.8$.

Výsledok identifikácie FIR modelu môžeme vidieť na Obr. 2.5b. Minimálna veľkosť modelu, ktorá dokázala vhodne opísať dané dáta v stanovnej chybe merania, bola $n_b = 11$. Ako ukazuje Pareto front na Obr. 2.5a, tak tento rád modelu je aj najvhodnejším na opis nameraných údajov. V tomto prípade sme dali do pomeru presnosť odhadu a



Obr. 2.4: Namerané dáta z procesu opísaného prenosovou funkciou 1. rádu so zosilnením $K = 8$ a časovou konštantou $T = 2$.

maximálny rozptyl odhadu modelu, pričom hodnoty oboch vlastností sú vzťahnuté na výsledky dosiahnuté modelom 11. rádu.

Po intervalovom odhade parametrov sme získali FIR v nasledovnom tvare

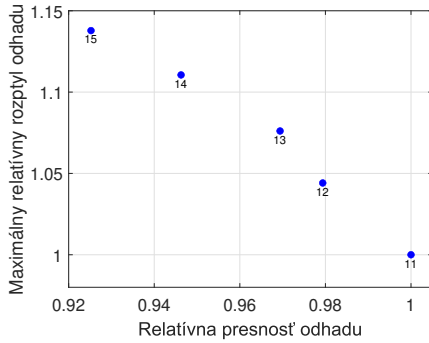
$$\begin{aligned}\hat{y}(t) = & [1.6587, 3.2587]u(t-1) + [-1.4459, 1.7541]u(t-2) + \\ & + [0.7417, 3.9417]u(t-3) + [-1.2112, 1.9888]u(t-4) + \\ & + [-1.8069, 1.3931]u(t-5) + [-0.8084, 2.3916]u(t-6) + \\ & + [-0.7821, 2.4179]u(t-7) + [-0.6424, 2.5576]u(t-8) + \\ & + [-1.3556, 1.8444]u(t-9) + [-2.7116, 0.4884]u(t-10) + \\ & + [0.2836, 1.9842]u(t-11).\end{aligned}$$

Výstup identifikácie ARX modelu môžeme vidieť na Obr. 2.6b. Minimálna štruktúra bola opísaná diferenčnou rovnicou procesu 1. rádu a podobne ako pri identifikácii FIR modelu, takáto štruktúra ARX modelu je aj najvhodnejšou na opis nameraných dát. To nám potvrdzuje aj Pareto front, ktorý je zobrazený na Obr. 2.6a. Treba zdôrazniť fakt, že modely vyššieho rádu sú po kvalitatívnej stránke modelu výrazne horšie v porovnaní s ARX modelom 1. rádu.

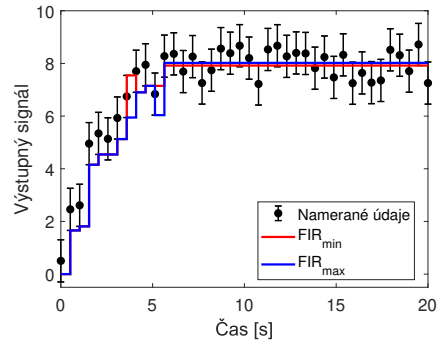
Po odhade intervalových hodnôt parametrov, sme získali model v tvare

$$\hat{y}(t) = [0.7581, 0.7840]\hat{y}(t-1) + [1.7396, 1.9155]u(t-1).$$

Rozdiel v zložitosti modelov je očividný, avšak v oboch prípadoch sme získali oblasť

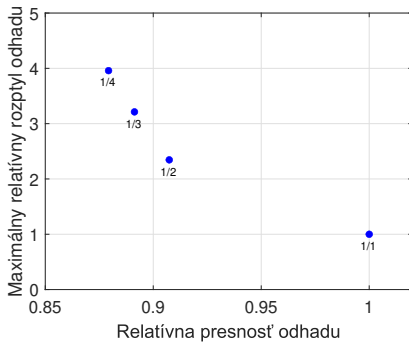


(a) Pareto front.

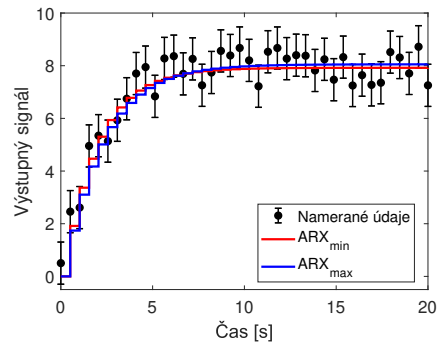


(b) Identifikácia FIR modelu.

Obr. 2.5: Výsledok identifikácie FIR modelu ($n_b = 11$) — minimálna realizácia (červená), maximálna realizácia (modrá), namerané údaje s danou chybou merania (čierna). Čísla pod ukazovateľmi Pareto frontu vyjadrujú rád FIR modelu.



(a) Pareto front.



(b) Identifikácia ARX modelu.

Obr. 2.6: Výsledok identifikácie ARX modelu ($n_b = 1, n_a = 1$) — minimálna realizácia (červená), maximálna realizácia (modrá), namerané údaje s danou chybou merania (čierna). Čísla pod ukazovateľmi Pareto frontu vyjadrujú rád ARX modelu v tvare $\frac{n_b}{n_a}$.

riešení, ktorá nám garantuje, že skutočné riešenie leží niekde vo vnútri. Táto oblasť je definovaná kombináciou minimálnych resp. maximálnych parametrov, ktoré nám zabezpečia spodné (minimálna realizácia) resp. horné (maximálna realizácia) ohraničenie. Treba taktiež spomenúť, že nie sme odkázaný iba na intervalový odhad. Akonáhle získame informáciu o štruktúre modelu, môžeme využiť napríklad metódu najmenších štvorcov (MNS) na identifikáciu neznámych parametrov.

Časť II

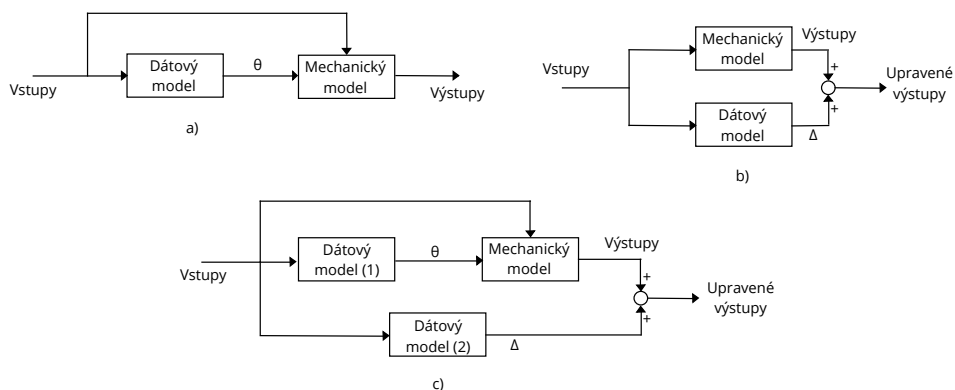
Hybridné modelovanie a jeho využitie v praxi

Hybridné modelovanie

Úlohou modelovania procesov je získať matematický predpis na základe znalostí, ktoré o tomto procese máme [12]. V závislosti od prístupu k modelovaniu, môžeme získané modely rozdeliť do viacerých skupín. Prvou skupinou sú takzvané “mechanistické” modely. Tieto sú odvodené z fyzikálnych zákonov, ktoré predstavujú rôzne zákony zachovania – bilancie, hmoty alebo energie, zákony kinetiky, termodynamiky, prestupu látky atď [3]. Takéto modely sú transparentné a ľahko pochopiteľné, pretože majú za sebou skutočnú fyzikálnu podstatu, ktorá platí pre široké spektrum prevádzkových podmienok. Nevýhodou býva, že často sú veľmi zložité a samotné modelovanie je náročné na čas. Druhú skupinu tvoria dátové modely, ktorých problematiku sme rozobrali v predchádzajúcich kapitolách. Spomenieme, že majú viacero výhod — sú jednoduché na získanie, čím ušetríme značné množstvo času s modelovaním, často majú jednoduchšiu štruktúru, sú flexibilnejšie atď. Nevýhodou však je, že ich štruktúra nám neprezradí nič o samotnej povahe procesu. Hybridné modely tvoria tretiu skupinu a sú kombináciou mechanistických a dátových modelov, pričom využívajú výhody z oboch skupín, čím našli široké uplatnenie v rôznych oblastiach — bioinžinierstvo [32], strojnictvo [18], životné prostredie [19], energetika [28] atď.

3.1 Hybridné modely

Základy hybridného modelovania položili Psychogios a Ungar v práci “*A hybrid neural network-first principles approach to process modeling*” z roku 1992 [27]. Ich cieľom bolo vytvoriť hybridný model založený na neurónovej sieti a mechanistickom modeli vsádzkového biochemického reaktora. Vo výsledku sa im podarilo zlepšiť presnosť predikcie v porovnaní so samotným mechanistickým modelom, dosiahnuť lepšiu interpoláciu a extrapoláciu na rozdiel od samotnej neurónovej siete a výrazne sa uľahčila analýza a interpretácia dát.



Obr. 3.1: Architektúra hybridných modelov - a) v sérii, b) paralelne, c) kombinácia v sérii-paralelne.

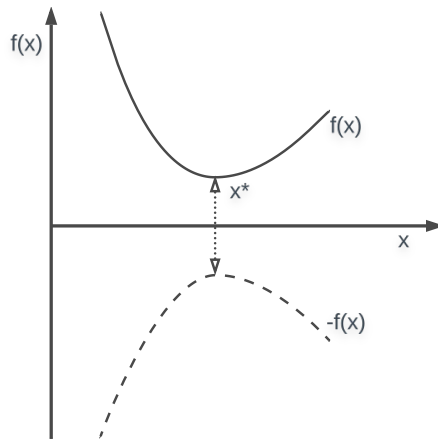
Treba zdôrazniť, že pri viacerých chemických, biologických a rôznych ďalších procesoch sú parametre modelu neznáme, pretože zohľadňujú napr. kinetiku konkrétnej chemickej reakcie alebo rast mikroorganizmov, ktorý je špecifický pre konkrétny druh. Ak dátový model dokáže poskytnúť tieto neznáme parametre mechanistickému modelu, tak výsledný hybridný model je vhodný aj na predikciu údajov, a tým pádom sa môže využiť na optimalizáciu procesov.

Existuje veľa rôznych kombinácií mechanistických a dátových modelov, ktoré vedú k ešte väčšiemu množstvu hybridných modelov, ale vo všeobecnosti by sme mohli sformulovať tri základné štruktúry hybridných modelov, ktoré sú zobrazené na Obr. 3.1.

Zapojenie v sérii. Takáto štruktúra hybridných modelov sa využíva na odhad neznámych a časovo-premenných kinetických parametrov θ [5].

Paralelné zapojenie. Zatiaľ čo nominálny mechanistický model zachytáva správanie systému, dátová časť koriguje rozdiely Δ medzi skutočným zariadením a mechanistickým modelom. Dátový model natrénovaný na týchto rozdieloch, kompenzuje chyby, ktoré vyplývajú z bežných variácií procesu a nelineárnej komplexnej kinetiky [5].

Kombinovaný prístup – sériovo-paralelné zapojenie. V tomto prípade daná architektúra obsahuje dva dátové modely – jeden, ktorý odhaduje neznáme parametre systému θ (v sérii) a druhý, ktorý upravuje výstupy z mechanistického modelu o rozdiel oproti skutočnému zariadeniu (paralelne).



Obr. 3.2: Minimum účelovej funkcie $f(x)$ je v rovnakom bode ako maximum $-f(x)$.

3.2 Optimalizácia prevádzky dynamických systémov

Optimalizácia je prostriedok, ktorým sa dosiahne najlepší výsledok za daných okolností. Pri navrhovaní, stavbe a údržbe akéhokoľvek inžinierskeho systému, musia inžinieri prijať mnoho technologických a manažérskych rozhodnutí v niekoľkých fázach. Konečným cieľom všetkých takýchto rozhodnutí je buď minimalizovať potrebné úsilie alebo maximalizovať požadovaný úžitok. Pretože úsilie alebo úžitok, požadovaný v akejkoľvek praktickej situácii, môže byť vyjadrený ako funkcia určitých rozhodovacích premenných, optimalizácia môže byť definovaná ako proces hľadania podmienok, ktoré poskytujú maximálnu alebo minimálnu hodnotu funkcie. Na Obr. 3.2 môžeme vidieť, že ak bod x^* zodpovedá minimálnej hodnote funkcie $f(x)$, rovnaký bod zodpovedá maximálnej hodnote negatívnej hodnoty $-f(x)$ tej istej funkcie. V tom prípade môžeme optimalizáciu bez straty zovšeobecniť na proces minimalizácie, pretože maximum funkcie dokážeme nájsť ako minimum negatívnej hodnoty rovnakej funkcie [29].

Pri návrhu optimalizačného problému, môže nastať niekoľko situácií – (a) v najlepšom prípade získame neohraničenú optimalizačnú úlohu, (b) budeme mať ohraničenia v tvare rovnosti alebo (c) zakomponujeme aj ohraničenia v tvare nerovností. Všetky tieto problémy sa často vyskytujú pri riešení efektivity zariadenia a nazývajú sa problémy statickej [1]. Statická je preto, lebo premenné x účelovej funkcie $f(x)$ sú nezávislé od času, nemenia sa.

Majme všeobecný dynamický systém, ktorý vieme opísať nasledovným modelom

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x, u, \theta),$$

kde x sú stavy systému, u je riadiaca veličina a θ predstavuje parametre modelu. Potom ak definujeme účelovú funkciu $\ell_e(\bar{x}, \bar{u})$, ktorá vyjadruje ekonomickú kvalitu systému, môžeme získať optimálne ustálené stavy $\bar{x}^*, \bar{u}^*$ ako

$$\begin{aligned} \min_{\bar{x}, \bar{u}} \quad & \ell_e(\bar{x}, \bar{u}), \\ \text{s.t.} \quad & \dot{x} = f(t, x, u, \theta) = 0 \\ & \bar{x}_{\min} \leq \bar{x} \leq \bar{x}_{\max} \\ & \bar{u}_{\min} \leq \bar{u} \leq \bar{u}_{\max} \end{aligned} \tag{3.1}$$

ktoré zaručia, že daná účelová funkcia bude dosahovať minimum v danom bode [13]. Takýmto spôsobom dokážeme na základe statickej optimalizácie optimalizovať prevádzku akéhokoľvek dynamického systému. Treba však zdôrazniť, že celá táto problematika je založená na poznaní matematického opisu zariadenia. V prípade, že model nebude ekvivalentný so skutočným zariadením (čo v podstate nikdy nie je), získané výsledky nebudú optimálne, v horšom prípade môžu narušiť celé fungovanie zariadenia. To ako sa vysporiadať s touto problematikou vysvetlíme v nasledujúcich častiach.

3.2.1 Dvojkroková optimalizácia

Dvojkroková optimalizácia je metóda, ktorá pozostáva z dvoch krokov, resp. z dvoch optimalizačných úloh. V prvom kroku, na základe nameraných údajov vstupov u a stavov x resp. výstupov y , odhadneme neznáme parametre modelu, ktorý opisuje náš dynamický systém. Túto optimalizačnú úlohu by sme mohli sformulovať podobne ako uvádza rovnica (1.22). V druhom kroku využijeme informácie z tohto modelu, napr. informácie o ustálených stavoch $\bar{x}$, na výpočet optimálnych ustálených hodnôt $\bar{x}^*, \bar{u}^*$, ktoré môžeme aplikovať na naše zariadenie. Takúto problematiku by sme mohli sformulovať ako v prípade (3.1). V princípe je možné tento cyklus zopakovať niekoľkokrát, pričom po každom cykle by sme mali získať presnejšie výsledky vzhľadom na daný model.

V skutočnosti táto metóda nerieši problém v rozdiel medzi skutočným zariadením a modelom, i keď v určitých prípadoch dokážeme ladením parametrov modelu zmenšiť tento rozdiel.

3.2.2 Schéma úpravy modifikátora

Najskôr treba uviesť, že ide o metódu, ktorá jednak hľadá optimum prevádzky dynamických systémov a jednak rieši problematiku rozdielu nominálneho modelu od skutočnosti. Okrem iného ide o techniku, ktorá má uplatnenie v dynamickej optimalizácii a v posledných rokoch nadobudla na významnosti [20].

Schéma úpravy modifikátora (*angl. “Modifier Adaptation Scheme”*) je iteračná metóda, ktorá má skvelé uplatnenie v reálnom živote. Hlavnými črtami sú spôsob, akým sa merania používajú na korekciu nominálneho modelu, a úloha, ktorú neskôr model zohráva pri výpočte ďalších vstupov.

Princíp tejto metódy spočíva v úprave gradientu účelovej funkcie nominálneho modelu $\nabla_N \ell_e(\bar{x}, \bar{u})$ následovným štýlom

$$\nabla J = \nabla_N \ell_e(\bar{x}, \bar{u}) + \lambda_k, \quad (3.2)$$

kde λ_k predstavuje hodnotu modifikátora v k -tom kroku. Upravený gradient po integrácii má tvar

$$J = \ell_e(\bar{x}, \bar{u}) + \lambda_k u. \quad (3.3)$$

Hodnota modifikátora v k -tom kroku je určená na základe váhovania dvoch faktorov. Určitú časť prispievajú minulé hodnoty modifikátora λ_{k-1} a zvyšnú časť tvorí rozdiel v gradientoch účelových funkcií Δ_{k-1} skutočného zariadenia a nominálneho modelu

$$\lambda_k = c\lambda_{k-1} + (1 - c)\Delta_k, \quad (3.4)$$

kde c je váhový koeficient, ktorý môže nadobúdať hodnoty $c \in \{0; 1\}$ v závislosti od toho, či chceme aby sa modifikátor menil viac alebo menej s pribúdajúcimi dátami.

Hodnotu premennej Δ_k je náročné určiť správne, pretože obsahuje gradient účelovej funkcie reálneho zariadenia $\nabla_P \ell_e(\bar{x}, \bar{u})$, ktorý my nemáme k dispozícii a preto je nutné ho odhadnúť napr. metódou konečných rozdielov

$$\nabla_P \ell_{e,k}(\bar{x}, \bar{u}) = \frac{\ell_{e,k}(\bar{x}, \bar{u}) - \ell_{e,k-1}(\bar{x}, \bar{u})}{\bar{u}_k - \bar{u}_{k-1}}. \quad (3.5)$$

Potom Δ_k môžeme definovať ako

$$\Delta_k = \nabla_P \ell_{e,k}(\bar{x}, \bar{u}) - \nabla_N \ell_{e,k}(\bar{x}, \bar{u}). \quad (3.6)$$

Treba spomenúť fakt, že práve odhad gradientu účelovej funkcie skutočného zariadenia $\nabla_P \ell_{e,k}(\bar{x}, \bar{u})$ spôsobuje najväčšie nepresnosti, najmä kvôli šumu merania.

3.2.3 Použitie hybridných modelov

Hybridné modelovanie si takisto dokáže poradiť s optimalizáciou prevádzky, pričom jasnou výhodou je, že nepotrebuje odhadovať gradient účelovej funkcie, ktorý prispieva najväčšou neistotou metóde úpravy modifikátora. V niektorých vedeckých publikáciách sa ukázalo, že využitie hybridných modelov, pri optimalizácii prevádzky dynamických systémov, výrazne dopomohlo k zvýšeniu efektivity, najmä kvôli lepším predikčným vlastnostiam hybridných modelov [5].

Pri zostavovaní optimalizačnej úlohy musíme dbať na funkčnosť hybridného modelu. V prípade sériového zapojenia by táto optimalizačná úloha mohla vyzeráť nasledovne

$$\begin{aligned} \min_{\bar{x}, \bar{u}} \quad & \ell_e(\bar{x}, \bar{u}) . \\ \text{s.t.} \quad & \dot{x} = f(t, x, u, \theta) = 0 \\ & \theta = g(u) \end{aligned} \tag{3.7}$$

Dátový model $g(u)$, ktorý bol vopred natrénovaný na dátach zo zariadenia, odhaduje parametre systému θ na základe meniacej sa vstupnej veličiny u . Odhadnuté parametre dopĺňajú nominálny mechanistický model $f(t, x, u, \theta)$, ktorý poskytuje údaje o ustálených stavoch $\bar{x}$ v účelovej funkcii $\ell_e(\bar{x}, \bar{u})$.

Paralelné zapojenie je trochu odlišné. Jednak vychádza z predpokladu, že nominálny model, ktorý máme je už identifikovaný. Tým pádom dokážeme získať údaje o rozdieloch Δ medzi výstupmi zo skutočného zariadenia a nominálneho modelu. Ná týchto dátach je natrénovaný dátový model $h^{(1)}(u)$, ktorý na základe vstupných údajov u upravuje výstupy ustálených stavov $\bar{x}$ z mechanistického modelu $f(t, x, u)$. Optimalizačnú úlohu by sme mohli sformulovať ako

$$\begin{aligned} \min_{\hat{x}, \bar{u}} \quad & \ell_e(\hat{x}, \bar{u}) , \\ \text{s.t.} \quad & \dot{x} = f(t, x, u) = 0 \\ & \hat{x} = \bar{x} + \Delta \\ & \Delta = h^{(1)}(u) \end{aligned} \tag{3.8}$$

kde $\hat{x}$ predstavuje upravené ustálené stavy z hybridného modelu.

Sériovo–paralelná štruktúra je akousi kombináciou oboch predchádzajúcich architektúr a optimálne ustálené hodnoty $\bar{x}^*, \bar{u}^*$ môžeme získať vyriešením optimalizačnej úlohy v

tvare

$$\begin{aligned}
 \min_{\hat{x}, \bar{u}} \quad & \ell_e(\hat{x}, \bar{u}) . \\
 \text{s.t.} \quad & \dot{x} = f(t, x, u, \theta) = 0 \\
 & \theta = g(u) \\
 & \hat{x} = \bar{x} + \Delta \\
 & \Delta = h^{(2)}(u)
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

Treba však zdôrazniť, že dátový model paralelného zapojenia $h^{(1)}$ nie je totožný s dátovým modelom $h^{(2)}$ kombinovaného zapojenia, pretože v tomto usporiadaní sú dáta o rozdieloch Δ odlišné. Je to spôsobené najmä kvôli meniacim sa parametrom θ mechanistického modelu, ktoré sú odhadované druhým dátovým modelom $g(u)$. Na druhej strane, dátový model $g(u)$ môže byť rovnaký ako v sériovom zapojení a často aj býva rovnaký.

Optimalizácia biochemického reaktora

V tejto časti sa budeme venovať, ako už napovedá aj samotný názov, ekonomickej optimalizácii konkrétneho dynamického systému a to prietokového biochemického reaktora. Prečo? Je na to niekoľko dôvodov. V prvom rade sa biochemické reaktory považujú za dôležitú súčasť chemického priemyslu. Široká škála dôležitých zlúčenín ako farmaceutické produkty, rôzne polyméry alebo produkty potravinárskeho priemyslu sa vyrábajú pomocou určitého fermentačného média (rôzne baktérie, kvasinky, vláknité huby alebo enzýmy) za prísne stanovených podmienok v biochemickom reaktore [31]. V druhom rade, biochemické reaktory vykazujú širokú škálu dynamického správania a ponúkajú veľa problémov s modelovaním v dôsledku prítomnosti živých organizmov (mikroorganizmov), ktorých rýchlosť rastu je opísaná komplexnými kinetickými výrazmi [27]. A v neposlednom rade, optimalizácia prietokového biochemického reaktora je aj jedným z hlavných cieľov tejto práce.

4.1 Biochemický reaktor - Základné informácie

Biochemický reaktor sa dá vo všeobecnosti definovať ako nádoba, ktorá využíva aktivitu biologického katalyzátora na dosiahnutie požadovanej chemickej premeny [16]. Biochemický reaktor všeobecne poskytuje biomechanické a biochemické prostredie, ktoré riadi prenos živín a kyslíka do buniek a produkty metabolizmu z buniek. Dal by sa tiež označiť ako zariadenie, určené na optimálny rast a metabolickú aktivitu organizmu, pôsobením biokatalyzátora, enzýmu alebo mikroorganizmov a buniek zvierat alebo rastlín. Surovinou môže byť organická alebo anorganická chemická zlúčenina alebo dokonca komplexný materiál. Produkt konverzie môže zahŕňať pekárské kvasinky, proteín, štartovacie kultúry alebo primárne metabolity (napr. aminokyseliny, organické kyseliny, vitamíny, polysacharidy, etanol atď.) a sekundárne metabolity (napr. antibiotiká). Biochemické reaktory sa môžu použiť na biokonverziu alebo biotransformáciu produktov (steroidná biotransformácia, L-sorbitol), enzýmov (amyláza, lipáza, celu-

láza), rekombinantných produktov (niektoré vakcíny, hormóny, ako je inzulín a rastové hormóny). Biochemický reaktor musí byť navrhnutý tak, aby vyhovoval konkrétnemu procesu [16].

4.1.1 Rozdelenie biochemických reaktorov

Na základe spôsobu prevádzky môže byť biochemický reaktor klasifikovaný ako vsádzkový, kontinuálny a polovsádzkový.

Pri vsádzkovom spôsobe sa sterilné kultivačné médium naočkuje mikroorganizmami. Počas tohto reakčného obdobia sa s časom menia množstvá buniek, substrátu vrátane výživných solí, vitamínov a produktov. Fermentácia prebieha vopred stanovenú dobu a produkt sa zozbiera na konci.

V polovsádzkovom režime sa do reaktora postupne pridávajú živiny, ako prebiehajú biochemické reakcie, aby sa získali lepšie výťažky a vyššia selektivita spolu s reguláciou reakčnej teploty. Produkty sa zbierajú na konci výrobného cyklu ako pri vsádzkovom biochemickom reaktore. Charakteristickou črtou kontinuálneho biochemického reaktora je proces neustáleho dodávania substrátu. Prúd kvapaliny alebo suspenzie sa kontinuálne privádza a odstraňuje z reaktora. Na dosiahnutie rovnomerného zloženia a teploty je potrebné mechanické alebo hydraulické miešanie. Kultivačné médium, ktoré je buď sterilné alebo obsahuje mikroorganizmy, sa nepretržite dodáva do biochemického reaktora, aby sa udržal stabilný stav. Reakčné premenné a monitorovacie parametre zostávajú konzistentné a vytvárajú v reaktore časovo konštantný stav. Výsledkom je nepretržitá produktivita.

Tradičné vsádzkové miešacie tankové reaktory (STR) a kontinuálne miešané tankové reaktory (CSTR) sú široko prijímané v chemickom a biologickom priemysle kvôli ich jednoduchosti. Existujú aj iné biochemické reaktory, ktoré majú špeciálne konštrukčné a prevádzkové vlastnosti ako foto-bioreaktory, rotačné bubnové reaktory, hmlový, membránový biochemický reaktor, reaktory s náplňou a fluidnou vrstvou atď. Tieto boli navrhnuté tak, aby vyhovovali špecifickým procesom [16].

4.1.2 Parametre opisujúce biochemický reaktor

Hlavné premenné, ktoré opisujú mikrobiálne procesy v prírode sú uvedené v Tabuľke 4.1.

Množstvo mikroorganizmov môže byť vyjadrené ako biomasa x alebo počet buniek

Tabuľka 4.1: Prehľad hlavných dynamických parametrov opisujúcich biochemický reaktor [26].

Parameter	Symbol	Rozmer
Hustota/koncentrácia biomasy	x	μg bunkovej hmoty na g pôdy; g bunkovej hmoty m^{-2} pôdy; μg bunkovej hmoty na mL vody
Počet buniek	N	10^6 buniek na g pôdy; 10^6 buniek na mL vody
Dĺžka mycélia	L	m na g pôdy; m na mL vody
Počet hýf	n	10^6 na g pôdy; 10^6 na mL vody
Koncentrácia limitujúceho substrátu	s	mg na g pôdy; g m^{-2} pôdy; g L^{-1} vody
Koncentrácia produktu	p	mg na g pôdy; g m^{-2} pôdy; g L^{-1} vody

N pri jednobunkových organizmoch (baktérie, kvasinky, spóry) na jednotku pôdy, množstva vody, objemu alebo obsahu plochy. Vláknité organizmy (huby, aktinomycéty) sú charakterizované dĺžkou mycélia L a počtom hýf n . Treba zdôrazniť, že n nie je totožné s N , pretože vetvenie hýf skôr pripomína delenie buniek pri jednobunkových organizmoch. Vzťah medzi x , N a L nie je jednoznačný pretože hmota jednotlivých buniek a šírka hýf sa líši v závislosti od organizmu a podmienok rastu. Všeobecne možno povedať, že pri nadbytku výživných zlúčenín sa formujú veľké bunky resp. široké hýfy, zatiaľ čo pri hladovaní sa tvoria skôr menšie bunky alebo užšie hýfy. Výber biomasy x alebo počet buniek N alebo dĺžku mycélia L závisí na danom prípade. Biomasa x má očividnú výhodu pri skúmaní cyklu uhlíka a živín, zatiaľ čo počet buniek N sa preferuje pri skúmaní populácie napr. výskyt mutácií alebo prenos plazmidov [26].

Koncentrácia limitujúceho substrátu vo vode alebo v pôde, (s), predstavuje množstvo esenciálnej živiny využívané mikroorganizmami na rast a rozmnožovanie. Bežne nevieme posúdiť všetky potenciálne dostupné živiny a zamerať sa iba na jednu alebo zopár individuálnych zlúčenín alebo triedu molekúl, ktorá reprezentuje limitujúcu zlúčeninu, pretože chemoorganotrofné mikroorganizmy čerpajú energiu z organických zlúčenín, zatiaľ čo fotosyntetizujúce mikroorganizmy vyžadujú prísun svetla a zdroj fosforu, dusíka a železa [26].

Množstvo produktov (p). Sem patria všetky medziprodukty a konečné produkty metabolismu mikroorganizmov, ktoré vznikajú počas rastu. Typickými medziproduktmi sú organické kyseliny vznikajúce počas glykolýzy. Jediný konečný produkt aeróbnej mikrobiálnej dekompozície je oxid uhličitý, avšak pri anaeróbných podmienkach vznikajú rôzne organické kyseliny, alkoholy, ketóny atď [26].

4.2 Matematické modelovanie zariadenia

Najjednoduchším matematickým modelom, ktorý opisuje prietokový biochemický reaktor je tzv. Monod model. Tento model je veľmi obľúbený hlavne kvôli svojej jednoduchosti. Zakladá sa na dvoch predpokladoch: 1) špecifická rýchlosť rastu buniek závisí od koncentrácie substrátu a 2) tvorba biomasy je spojená so spotrebou substrátu. Formulácia rovníc, ktoré popisujú materiálovú bilanciú biomasy je nasledovná

$$\begin{pmatrix} \text{akumulácia} \\ \text{bunkovej} \\ \text{hmoty} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{množstvo} \\ \text{vzniknutých} \\ \text{buniek} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{množstvo} \\ \text{odobraných} \\ \text{buniek} \end{pmatrix}$$

a pre materiálovú bilanciú substrátu platí

$$\begin{pmatrix} \text{akumulácia} \\ \text{substrátu} \\ \text{v systéme} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{množstvo} \\ \text{dodaného} \\ \text{substrátu} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{množstvo} \\ \text{odobraného} \\ \text{substrátu} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{množstvo} \\ \text{spotrebovaného} \\ \text{substrátu MO} \end{pmatrix}$$

Ak uvažujeme, že objem reaktora V sa nemení a prítok substrátu sa rovná odtoku suspenzie $F_{in} = F_{out} = F$, potom môžeme písať

$$V \left(\frac{dx}{dt} \right) = V\mu(s)x - Fx, \quad (4.1)$$

$$V \left(\frac{ds}{dt} \right) = F s_{in} - F s - V \frac{1}{Y_x} \mu(s)x, \quad (4.2)$$

kde x je koncentrácia biomasy v systéme, $\mu(s)$ je špecifická rýchlosť rastu mikroorganizmu, s je koncentrácia substrátu, s_{in} je koncentrácia čerstvého substrátu na vstupe a Y_x je výťažok biomasy [26]. Obe strany rovníc vydelíme objemom reaktora a označme si pomer $F/V = D$ ako rýchlosť riedenia, potom rovnice (4.1) a (4.2) môžeme upraviť do nasledovného tvaru

$$\frac{dx}{dt} = (\mu(s) - D)x, \text{ kde } \mu(s) = \mu_m \frac{s}{K_M + s}, \quad (4.3)$$

$$\frac{ds}{dt} = D(s_{in} - s) - \frac{1}{Y_x} \mu(s)x, \quad (4.4)$$

kde μ_m je maximálna špecifická rýchlosť rastu a K_M je Michaelisova konštanta.

Tabuľka 4.2: Parametre Monod modelu, ich symbol a rozmer.

Parameter	Symbol	Rozmer
Špecifická rýchlosť rastu	$\mu(s)$	h^{-1}
Maximálna špecifická rýchlosť rastu	μ_m	h^{-1}
Michaelisova konštanta	K_M	g L^{-1}
Výťažok (biomasa)	Y_x	
Objem reaktora	V	L
Prietok substrátu/suspenzie	F	L h^{-1}
Koncentrácia biomasy	x	g L^{-1}
Koncentrácia substrátu	s	g L^{-1}
Koncentrácia čerstvého substrátu	s_{in}	g L^{-1}

4.2.1 Základné mechanistické modely biochemického reaktora

Rovnice (4.3) a (4.4) tvoria najjednoduchší opis biochemického reaktora — Monod model, a význam jednotlivých parametrov je uvedený v Tabuľke 4.2. Avšak, tento model má množstvo nedostatkov. Nedokáže vysvetliť jednotlivé fázy rastu, ktoré sú pozorované experimentálne a to: lag-fázu, smrť buniek na základe hladovania, tvorbu produktu atď. Tieto nedostatky boli doplnené u tzv. štrukturovaných modelov. Model, ktorý berie do úvahy aj tvorbu produktu, získame doplnením Monod modelu

$$\frac{dx}{dt} = (\mu(s) - D)x, \quad (4.5)$$

$$\frac{ds}{dt} = D(s_{in} - s) - \frac{1}{Y_x}\mu(s)x - \frac{1}{Y_p}\nu x, \quad (4.6)$$

$$\frac{dp}{dt} = \nu x - Dp, \quad (4.7)$$

kde p predstavuje koncentráciu produktu v g L^{-1} , Y_p je bezrozmerný koeficient výťažnosti produktu a ν predstavuje kinetický člen rýchlosti tvorby produktu v jednotkách času napr. h^{-1} . Do rovnice (4.4) sme doplnili časť, ktorá vraví, že časť substrátu sa spotrebuje na tvorbu produktu a rovnica (4.7) predstavuje obyčajnú materiálovú bilanciu produktu.

Ak by sme chceli do modelu zakomponovať tendenciu úmrtia mikroorganizmov v dôsledku príliš vysokej koncentrácie substrátu (vplyv osmotického tlaku), treba upraviť špecifickú rýchlosť rastu $\mu(s)$ tak, že bude obsahovať inhibičný člen K_I , ktorého rozmer je g L^{-1} . Špecifická rýchlosť rastu potom nadobudne tvar

$$\mu(s) = \mu_m \frac{s}{K_M + s + \frac{s^2}{K_I}} \quad (4.8)$$

a model, ktorého špecifická rýchlosť rastu má takéto vlastnosti, sa zvykne nazývať inhibičný alebo tiež Haldane model.

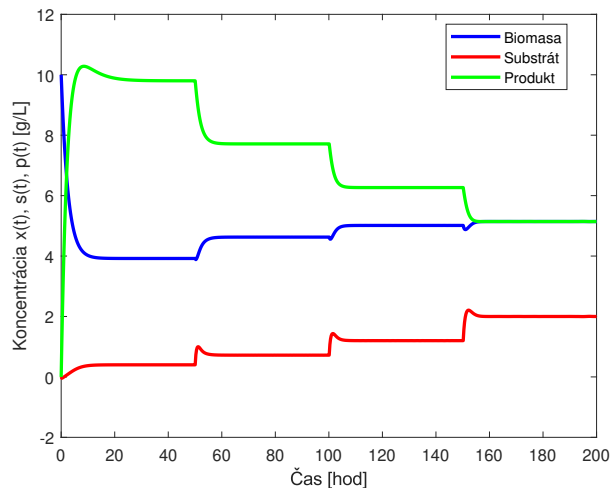
4.3 Analýza matematických modelov

V predchádzajúcej časti sme spomenuli viacero modelov, ktorými môžeme opísať biochemický reaktor. V tejto časti sa budeme venovať analýze dynamiky a stability dvoch modelov a to Monod modelu doplnenému o produktovú časť a Haldane modelu.

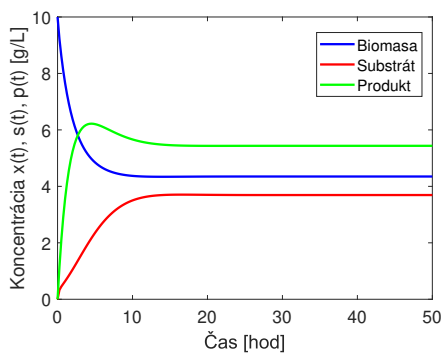
4.3.1 Dynamika

Matematický model, ktorý opisuje biochemický reaktor je nelineárny model. To znamená, že odozva systému je rôzna pre rovnakú veľkosť skokovej zmeny pri rôznych začiatočných podmienkach. Túto nelinearitu si možno všimnúť na Obr. 4.1. Ten opisuje časový priebeh koncentrácie biomasy, substrátu a produktu Monod modelu pri viacerých skokových zmenách v rýchlosti riedenia. Ďalej si môžeme všimnúť prudký nárast koncentrácie produktu na počiatku, ktorý bol spôsobený nadbytkom biomasy v systéme. Po ustálení dynamika produktu pripomína systém 1. rádu. Na druhej strane v dynamike tvorby biomasy sa prejavuje nestabilná nula (menšie podkmity), ktoré sú spôsobené v dôsledku zvýšenia prietoku látky cez reaktor. Keďže pritečie viac substrátu, čím sa zvýši jeho koncentrácia, koncentrácia biomasy naopak klesne, keďže odtečie viac suspenzie. Následne zvýšená koncentrácia substrátu podporí rast biomasy a tým sa aj koncentrácia biomasy začne zvyšovať. V dynamike substrátu sa zasa prejavuje stabilná nula, ktorá opäť súvisí s väčším prítokom čerstvého média a pomalšou spotrebou substrátu na tvorbu biomasy a produktu.

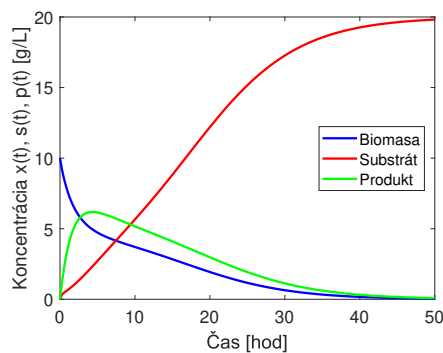
Režim fungovania biochemického reaktora má významný vplyv na dynamiku celého systému a pri určitých podmienkach Monod model a model s inhibíciou môžu vykazovať rovnaké správanie. Avšak, pri nesprávne zvolených pracovných podmienkach, či už počiatočných podmienkach systému, koncentrácie čerstvého substrátu alebo rýchlosti riedenia, model s inhibíciou bude vykazovať diametrálne odlišné správanie od Monod modelu, ako to je zobrazené na Obr. 4.2. Ako môžeme vidieť, zatiaľ čo Monod model sa dostal do nenulového ustáleného stavu, model s inhibíciou klesol s koncentráciou biomasy a produktu na nulu, zatiaľ čo koncentrácia substrátu stúpala na hodnotu 20 g L^{-1} . Tento stav, kedy reaktorom preteká čistý substrát sa nazýva stav “vymytia” alebo “výplach” a prevádzka reaktora je nenávratne narušená.



Obr. 4.1: Časový priebeh koncentrácie biomasy $x(t)$, substrátu $s(t)$ a produktu $p(t)$ Monod modelu pri viacnásobnej skokovej zmene rýchlosti riedenia $D = [0.2, 0.3, 0.4, 0.5]$. Parametre modelu: $\mu_m = 0.8\text{h}^{-1}$, $\nu = 0.5\text{h}^{-1}$, $K_M = 1.2\text{g L}^{-1}$, $Y_x = 0.4$, $Y_p = 1$, $s_{in} = 20\text{g L}^{-1}$, $s_0 = p_0 = 0\text{g L}^{-1}$, $ax_0 = 10\text{g L}^{-1}$.

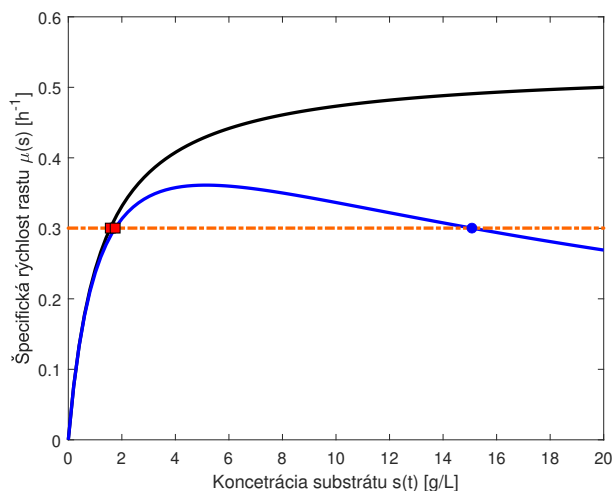


(a) Monod model



(b) Haldane model

Obr. 4.2: Porovnanie dynamiky modelov pri rovnakých pracovných podmienkach. Parametre modelov: $\mu_m = 0.8\text{h}^{-1}$, $\nu = 0.5\text{h}^{-1}$, $K_M = 1.2\text{g L}^{-1}$, $K_I = 20\text{g L}^{-1}$, $Y_x = 0.4$, $Y_p = 1$, $s_{in} = 20\text{g L}^{-1}$, $s_0 = p_0 = 0\text{g L}^{-1}$, $ax_0 = 10\text{g L}^{-1}$.



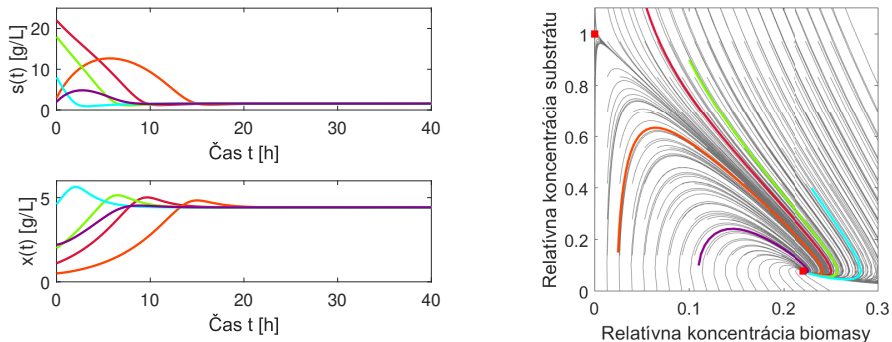
Obr. 4.3: Porovnanie priebehu špecifickej rýchlosti rastu Monod (čierna) a Haldane (modrá) modelu. Zvolená rýchlosť riedenia $D = 0.33\text{h}^{-1}$ (oranžová), stabilné ustálené stavy (červený štvorec), nestabilný stav (modrý krúžok).

4.3.2 Stabilita

Výhodou prietokových biochemických reaktorov je, že pri dodržaní správnych podmienok, dokážeme systém uviesť do časovo konštantného stavu. Z rovnice (4.3) vyplýva, že na dosiahnutie ustáleného stavu, je nutné, aby sa buď špecifická rýchlosť rastu rovnala rýchlosti riedenia (takto získame netriviálne riešenie), alebo koncentrácia biomasy je v ľubovolnom čase rovná nule (takto získame triviálne riešenie – stav vymytia). Ustálené stavy modelov môžeme vidieť na Obr. 4.3, ktorý zobrazuje priebeh špecifickej rýchlosti rastu od koncentrácie substrátu pri konštantnej rýchlosti riedenia. Je dobré si všimnúť, že zatiaľ čo Monod model má iba jeden nenulový ustálený stav, model s inhibíciou už obsahuje dva.

Na fázovom diagrame Monod modelu (Obr. 4.4b), môžeme vidieť oba ustálené stavy. Ak zvolíme začiatočné podmienky rôzne od nuly (najmä pri koncentrácii biomasy – vedú k triviálnemu riešeniu a systémom bude pretekať čerstvý substrát) pri konštantnej rýchlosti riedenia menšej alebo rovnjej ako špecifická rýchlosť rastu, sa vždy dostaneme do toho istého ustáleného stavu.

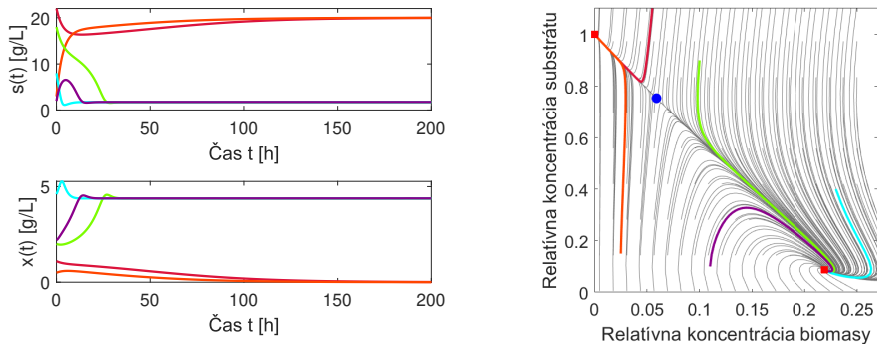
Model s inhibíciou vykazuje odlišné správanie. Na fázovom diagrame, Obr.4.5b, môžeme sledovať už dva nenulové stavy a jeden nulový. Výsledkom triviálneho riešenia je



(a) Časový priebeh koncentrácie biomasy $x(t)$ (b) Fázový diagram. Relatívny pomer vzhľadom na s_{in} .

Obr. 4.4: Stabilita a ustálený stav Monod modelu. Nastavenie parametrov modelu:

$$\mu_m = 0.8\text{h}^{-1}, \nu = 0.5\text{h}^{-1}, K_M = 1.2\text{g L}^{-1}, Y_x = 0.4, Y_p = 1, s_{in} = 20\text{g L}^{-1}.$$



(a) Časový priebeh koncentrácie biomasy $x(t)$ (b) Fázový diagram. Relatívny pomer vzhľadom na s_{in} .

Obr. 4.5: Stabilita a ustálený stav Haldane modelu. Nastavenie parametrov modelu:

$$\mu_m = 0.8\text{h}^{-1}, \nu = 0.5\text{h}^{-1}, K_M = 1.2\text{g L}^{-1}, K_I = 20\text{g L}^{-1}, Y_x = 0.4, Y_p = 1, s_{in} = 20\text{g L}^{-1}.$$

“výplach”, ktorý vedie k nulovej koncentrácii biomasy. Ako si môžeme všimnúť, vždy keď je rýchlosť rastu biomasy pomalšia ako je odtok suspenzie zo systému, dostaneme sa do výplachu. To môžeme vidieť na trajektórii zobrazenej ružovou alebo oranžovou farbou na Obr. 4.5b. Ostali dva netriviálne stavy, z ktorých jeden je nestabilný (modrý kruh) a druhý je stabilný (červený štvorec). V okolí nestabilného stavu môžu nastať dva prípady a to v závislosti od počiatočných podmienok. Ak sa na Obr. 4.3 nachádzame v okolí nestabilného stavu od neho naľavo (napr. koncentrácia substrátu $s = 12\text{ g L}^{-1}$), to znamená, že rýchlosť rastu biomasy je väčšia ako odtok suspenzie, dostaneme sa do nenulového ustáleného stavu. Ak sa nachádzame viac napravo (napr. koncentrácia substrátu $s = 18\text{ g L}^{-1}$), dostaneme sa do výplachu. V skutočnosti by sme to mohli interpretovať aj nasledovne. Ak sa nachádzame v okolí nestabilného stavu naľavo ($s = 12\text{ g L}^{-1}$), to znamená, že v dôsledku inhibície nám odumierajú niektoré slabšie mikroorganizmy, ale stále je v systéme dostatok takých, ktoré dokážu znížiť množstvo substrátu v prospech nárastu biomasy a produktu. Tým pádom nám klesne koncentrácia substrátu (pokles koncentrácie substrátu bude sprevádzaný aj poklesom koncentrácie biomasy) a dostaneme sa do stabilného ustáleného stavu. Ak sa však nachádzame napravo od nestabilného stavu ($s = 18\text{ g L}^{-1}$), letalita v dôsledku vysokého osmotického tlaku je omnoho väčšia ako vitalita mikroorganizmov a postupne inklinujeme k stavu vymytia.

Táto odlišnosť v správaní Monod a Haldane modelu je veľmi problematická. V prvom rade si treba uvedomiť, že dynamika systému oboch modelov je do určitého bodu totožná, čo nám vôbec neľahčuje výber vhodného modelu. V prípade, že si zvolíme nesprávny model, napr. Monod model a naše zariadenie bude vykazovať aj inhibičný efekt, teda Haldane model, tak pri optimalizácii alebo riadení pomocou takéhoto modelu sa môže veľmi ľahko stať, že uvedieme naše zariadenie do nenávratného stavu vymytia. V skutočnosti, vždy budeme zaznamenávať rozdiely v správaní zariadenia a modelu, pretože nedokážeme presne opísať správanie živých organizmov. Z tohto dôvodu sa treba vysporiadať s touto problematikou a vhodným adeptom sa javí byť hybridné modelovanie.

4.4 Ekonomická optimalizácia

V tejto časti zhrnieme hlavný cieľ tejto práce a to optimalizáciu prietokového biochemického reaktora pomocou hybridného modelovania s využitím metódy garantovaného odhadu parametrov. Ukážeme, na akom princípe bude takýto hybridný model fungovať a porovnáme ho s inými metódami, ktoré sa tak isto vedú vysporiadať s úlohou optimalizácie zariadenia. Najskôr, však potrebujeme zdefinovať problematiku.

Tabuľka 4.3: Nastavenie parametrov Monod a Haldane modelu.

Parameter	Symbol	Veľkosť
Maximálna špecifická rýchlosť rastu	μ_m	0.53h^{-1}
Michaelisova konštanta	K_M	1.20g L^{-1}
Rýchlosť tvorby produktu	ν	0.50h^{-1}
Výťažok (biomasa)	Y_x	0.40
Výťažok (produkt)	Y_p	1.00
Objem reaktora	V	3.33L
Prietok substrátu/suspenzie	F	1.00L h^{-1}
Koncentrácia substrátu na vstupe	s_{in}	20.00g L^{-1}
Koeficient inhibície	K_I	70.00g L^{-1}

Majme fiktívne zariadenie prietokového biochemického reaktora, ktoré vieme simulovať Monod modelom. Parametre tohto modelu, ako aj ich veľkosť, sú uvedené v Tabuľke 4.3. Výstupy, ktoré vieme merať zo zariadenia sú zafarbené chybou merania. Chyba merania má uniformné rozdelenie a v prípade koncentrácie biomasy bude rozptyl chyby $|e_x| = 0.05\text{g L}^{-1}$ a pre koncentráciu substrátu $|e_s| = 0.025\text{g L}^{-1}$.

Naším cenným produktom bude samotná biomasa (napr. pečiarenské droždie), takže sa budeme snažiť maximalizovať produkciu biomasy, ale na druhej strane budeme požadovať, aby sme pri tom minuli čo najmenej substrátu. Ak túto vetu transformujeme na matematický opis, môžeme získať takúto optimalizačnú úlohu

$$\begin{aligned} \min_D \quad & D(1 - \bar{x}), \\ \text{s.t.} \quad & 0 = f(x, s, D) \end{aligned} \tag{4.9}$$

kde funkcia $0 = f(x, s, D)$ vyjadruje vzťah medzi hodnotou ustáleného stavu koncentrácie biomasy, substrátu a rýchlosti riedenia. Túto funkciu získame z mechanistického modelu, ktorým je Haldane model resp. model s inhibíciou a pomocou neho sme opísali správanie nášho zariadenia. Parametre Haldane modelu sú tak isto uvedené v Tabuľke 4.3.

Ako sme už načrtli v prechádzajúcej časti, voľba modelu je veľmi náročná problematika, najmä z dôvodu, že za určitých podmienok vykazujú Monod aj Haldane model rovnaké správanie. Je to spôsobené tým, že Monod aj Haldane model sú veľmi podobné. V prípade, že koeficient inhibície K_I sa limitne blíži k nekonečnu, tak Haldane model dokáže skonvergovať na Monod model, čiže by sa dalo povedať, že Monod model je podmnožinou Haldane modelu. Treba brať ohľad aj na skutočnosť, že v reálnom živote sa vždy budeme stretávať s určitým vplyvom inhibície v dôsledku vysokého

osmotického tlaku. Kvôli týmto dôvodom sme sa rozhodli, že vhodný model na opis zariadenia bude Haldane model.

Ustálený stav Haldane modelu môžeme napísať v tvare

$$0 = (\mu(\bar{s}) - D) \bar{x}, \quad (4.10)$$

$$0 = D(s_{in} - \bar{s}) - \frac{1}{Y_x} \mu(\bar{s}) \bar{x} - \frac{1}{Y_p} \nu \bar{x}, \quad (4.11)$$

$$0 = \nu \bar{x} - D \bar{p}. \quad (4.12)$$

Z rovnice (4.10) sme získali dve riešenia — triviálne, ak koncentrácia biomasy bude v každom čase nulová, netriviálne, ak špecifická rýchlosť rastu bude rovná rýchlosti riedenia. Potom pre špecifickú rýchlosť rastu môžeme písať

$$\mu(\bar{s}) = D = \mu_m \frac{\bar{s}}{K_M + \bar{s} + \frac{\bar{s}^2}{K_I}} \implies \frac{D}{K_I} \bar{s}^2 + (D - \mu_m) \bar{s} + DK_M = 0. \quad (4.13)$$

Riešením tejto kvadratickej rovnice dostaneme dve riešenia, pričom fyzikálny zmysel má iba jedno

$$\bar{s} = -K_I \frac{(D - \mu_m) + \sqrt{(D - \mu_m)^2 - 4 \frac{D^2}{K_I} K_M}}{2D}. \quad (4.14)$$

Takto sme získali rovnicu ustáleného stavu koncentrácie substrátu. Ustálený stav koncentrácie biomasy vieme odvodiť z rovnice (4.11)

$$0 = D(s_{in} - \bar{s}) - \left(\frac{1}{Y_x} D + \frac{1}{Y_p} \nu \right) \bar{x} \implies \bar{x} = \frac{D(s_{in} - \bar{s})}{\frac{1}{Y_x} D + \frac{1}{Y_p} \nu}. \quad (4.15)$$

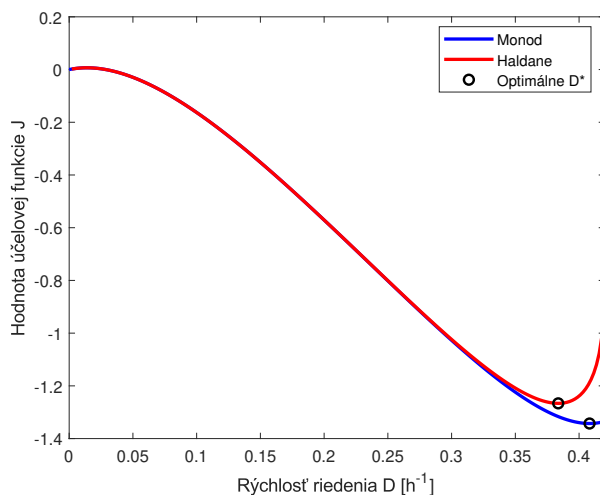
A nakoniec posledná rovnica (4.12) definuje hodnotu ustáleného stavu produktu

$$0 = \nu \bar{x} - D \bar{p} \implies \bar{p} = \frac{\nu}{D} \bar{x}. \quad (4.16)$$

Keďže už vieme aký predpis má funkcia $f(D, \bar{s})$, môžeme optimalizačnú úlohu (4.9) upraviť do nasledujúceho tvaru

$$\begin{aligned} \min_D \quad & D(1 - \alpha \bar{x}), \\ \text{s.t.} \quad & \bar{x} = \frac{D(s_{in} - \bar{s})}{\frac{1}{Y_x} D + \frac{1}{Y_p} \nu} \\ & \bar{s} = -K_I \frac{(D - \mu_m) + \sqrt{(D - \mu_m)^2 - 4 \frac{D^2}{K_I} K_M}}{2D} \end{aligned} \quad (4.17)$$

Kvôli problémom s definičným oborom účelovej funkcie Haldane modelu (viď rovnicu (4.14)), sme museli pridať do účelovej funkcie koeficient α , ktorého veľkosť sme empiricky



Obr. 4.6: Porovnanie účelovej funkcie Monod a Haldane modelu. Zariadenie je simulované Monod modelom a Haldane model predstavuje náš nepresný mechanistický model.

zvolili rovný $\alpha = 0.5$. Toto nám umožnilo rozšíriť definičný obor aspoň po oblasť optimálnej hodnoty Monod modelu a tak isto zabezpečuje váhovanie medzi jednotlivými členmi účelovej funkcie.

Treba zdôrazniť, že správanie takto nastaveného Haldane modelu je naprosto odlišné od nášho zariadenia, pretože za určitých podmienok sa prejavuje inhibícia v dôsledku vysokej koncentrácie substrátu, a preto bude mať optimum účelovej funkcie niekde inde ako naše zariadenie simulované Monod modelom, ako to vidno na Obr. 4.6. To znamená, že ak by sme sa riadili iba týmto nepresným mechanistickým modelom, naše zariadenie by vôbec nepracovalo najefektívnejšie ako to je len možné. Z tohto dôvodu sa budeme snažiť navrhnúť hybridný model tak, aby dokázal vyrovnať rozdiel medzi nominálnym modelom a zariadením.

Trénovanie dátových modelov.

Dátové modely predstavujú najdôležitejšiu časť hybridných modelov, pretože od nich závisí kvalita finálneho modelu. Dátové modely FIR a ARX identifikujeme pomocou metódy garantovaného odhadu parametrov (GOP) a tento proces rozdelíme na dve časti. V prvej časti sa budeme zaoberať problematikou určenia vhodného rádu modelu

a v druhej časti odhadu parametrov.

Pred samotnou identifikáciou potrebujeme upraviť namerané dáta, ktoré získame skokovou zmenou v rýchlosti riedenia D do tvaru

$$\Delta_s = \tilde{s} - s, \quad (4.18)$$

ktorý vyjadruje rozdiel nameraných údajov koncentrácie substrátu zariadenia $\tilde{s}$ a nominálneho modelu s . Ďalej budeme uvažovať model v tvare s odchylkovými premennými.

Pri určení minimálneho rádu FIR modelu vychádzame z rovnice (2.13), ktorú upravíme do nasledujúceho tvaru

$$\begin{aligned} \min_{B \in [b_1, b_2, \dots, b_{n_b}]} \quad & 0, \\ \text{s.t.} \quad & -\delta_s \leq \Delta_s - \hat{\Delta}_s \leq \delta_s \end{aligned} \quad (4.19)$$

kde $\hat{\Delta}_s$ predstavuje odhadnuté výstupy rozdielu koncentrácie substrátu FIR modelom a δ_s je chyba modelu.

Garantovaným odhadom parametrov v ďalšej časti identifikácie získame intervalové hodnoty parametrov, ktoré potrebujeme na posúdenie kvality modelu minimálneho rádu a modelov vyšších rádo. Intervalové určenie parametrov získame riešením modifikovanej optimalizačnej úlohy (2.14) ako

$$\begin{aligned} [b_i, \bar{b}_i] = \min_{B \in [b, \bar{b}]} / \max_{B \in [b, \bar{b}]} \quad & b_i, \\ \text{s.t.} \quad & -\delta_s \leq \Delta_s - \hat{\Delta}_s \leq \delta_s \end{aligned} \quad (4.20)$$

pre všetky $i = 1, 2, \dots, n_b$.

Teraz by sme mali zhodnotiť, či je FIR model minimálneho rádu vhodný na opis nameraných údajov a porovnať ho s modelmi vyššieho rádu. Na tento účel využijeme Pareto front, ktorý bude dávať do pomeru dve vlastnosti modelu a to sú presnosť odhadu a maximálny rozptyl odhadu. Presnosť odhadu vyjadruje vzdialenosť výstupu modelu od nameranej hodnoty a maximálny rozptyl odhadu predstavuje maximálnu vzdialenosť výstupu modelu od jeho maximálnej resp. minimálnej realizácie. Výsledný model by mal byť vhodným kompromisom medzi oboma vlastnosťami. Treba si však uvedomiť, že tieto vlastnosti sú v nepriamej úmere, takže ak by sme chceli zlepšiť presnosť odhadu, zhoršili by sme tým maximálny rozptyl odhadu. A našim cieľom je jednak dosiahnuť čo najlepšiu presnosť modelu (príliš veľká presnosť odhadu znamená, že dátový model odhaduje šum merania) a pri tom mať čo najmenší maximálny rozptyl

odhadu, pretože ten určuje šírku garantovanej oblasti, ktorá zaručuje, že najlepšie riešenie sa bude nachádzať vo vnútri.

Týmto sme ukončili identifikáciu FIR modelu. V prípade, že by sme identifikovali FIR model na dátach rozdielov koncentrácie biomasy Δ_x , budeme postupovať tak isto ako v prípade substrátu.

Problematika identifikácie ARX modelu na dátach, ktoré dokážeme získať z biochemického reaktora, je ekvivalentná s problematikou identifikácie FIR modelov s menšími rozdielmi v zadaní optimalizačnej úlohy. Z tohto dôvodu iba uvedieme, že určenie minimálneho rádu bude prebiehať na základe optimalizačnej úlohy (2.15) a intervalový odhad parametrov získame podľa (2.16).

Použitie hybridných modelov.

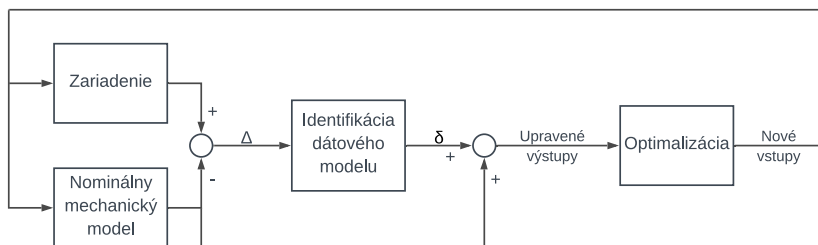
Na začiatku treba spomenúť, že ide o iteračnú metódu, ktorej schéma je zobrazená na Obr. 4.7. Musíme brať v úvahu, že dátové modely nemusia byť vždy úplne presne identifikované a takýto prístup to dokáže zohľadniť. Ďalšou výhodou je aj fakt, že týmto prístupom vieme zohľadniť meniace sa vlastnosti zariadenia počas celej prevádzky.

Celá problematika optimalizácie nášho zariadenia tkvie v tom, že správanie zariadenia a nominálneho modelu je odlišné a priebehy stavových veličín budú vykazovať rozdiel. Keďže my tento rozdiel dokážeme zaznamenávať, vhodnou štruktúrou na riešenie tejto problematiky sa javí byť paralelné zapojenie hybridného modelu.

Princíp optimalizácie demonštrujeme na situácii, keď dokážeme merať iba koncentráciu substrátu, pretože v praxi sa táto situácia vyskytuje bežnejšie. Z ustáleného stavu, spravíme skokovú zmenu v rýchlosti zriedovania D a na nameraných údajoch Δ_s identifikujeme dátový model. Takto natrénovaný dátový model využijeme na korekciu ustáleného stavu substrátu nominálneho modelu v optimalizačnej úlohe (4.17). Po úprave by sme ju mohli formulovať nasledovne

$$\begin{aligned}
 \min_D \quad & D(1 - \alpha\bar{x}), \\
 \text{s.t.} \quad & \bar{x} = \frac{D(s_{in} - s_{corr})}{\frac{1}{Y_x}D + \frac{1}{Y_x}\nu} \\
 & s_{corr} = \bar{\Delta}_s(D) + \bar{s} \\
 & \bar{s} = -K_I \frac{(D - \mu_m) + \sqrt{(D - \mu_m)^2 - 4\frac{D^2}{K_I}K_M}}{2D}
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

kde $\bar{\Delta}_s(D)$ je ustálený stav dátového modelu.



Obr. 4.7: Iteračný prístup s použitím hybridného modelovania.

Riešenie tejto upravenej optimalizačnej úlohy nám vráti novú hodnotu optimálneho D , odlišnú od predchádzajúcej a túto využijeme na generovanie novej skokovej zmeny, nových dát.

Takto postupujeme ďalej a v princípe môžeme tento optimalizačný proces ukončiť dvoma spôsobmi. V prvej situácii budeme konvergovať k nejakému ustálenému stavu za predpokladu, že hodnota účelovej funkcie bude klesať a my môžeme ukončiť optimalizáciu. V druhej situácii budeme zaznamenávať hodnoty účelovej funkcie a po istom čase zistíme, ktorá rýchlosť riedenia D dáva najlepšiu hodnotu účelovej funkcie. Túto rýchlosť riedenia potom vyhlásime za optimálnu a systém prevádzkujeme pomocou nej.

V skutočnom optime by ustálený stav dátového modelu $\bar{\Delta}_s$ mal nadobudnúť hodnotu

$$\bar{\Delta}_s = \hat{s}(D^*) - \bar{s}(D^*), \quad (4.22)$$

kde $\hat{s}(D^*)$ je hodnota ustáleného stavu koncentrácie substrátu zariadenia a $\bar{s}(D^*)$ nominálneho modelu pri rýchlosti riedenia D^* .

Ak by nastala situácia, že zo zariadenia vieme získať iba údaje o koncentrácii biomasy, princíp fungovania hybridného modelu by sa nezmenil. Zmenili by sa iba dáta resp. dátové modely. Zaznamenali by sme rozdiel v koncentrácii biomasy Δ_x a pripravili tréningové dáta ako

$$\Delta_x = \tilde{x} - x, \quad (4.23)$$

kde $\tilde{x}$ sú namerané údaje zo zariadenia a x sú dáta z nominálneho modelu. Na základe týchto údajov by sme identifikovali dátový model, ktorý by sme použili na úpravu ustáleného stavu biomasy $\bar{x}$ nominálneho modelu v optimalizačnej úlohe nasledovným

spôsobom

$$\begin{aligned}
 \min_D \quad & D \left(1 - \alpha \left(\bar{x} + \bar{\Delta}_x(D) \right) \right), \\
 \text{s.t.} \quad & \bar{x} = \frac{D(s_{in} - \bar{s})}{\frac{1}{Y_x}D + \frac{1}{Y_x}\nu} \\
 & \bar{s} = -K_I \frac{(D - \mu_m) + \sqrt{(D - \mu_m)^2 - 4\frac{D^2}{K_I}K_M}}{2D}
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

kde $\bar{\Delta}_x(D)$ predstavuje ustálený stav dátového modelu.

Avšak, medzi dátami koncentrácie substrátu a biomasy je kvalitatívny rozdiel, a tým je vplyv šumu merania. Zatiaľ čo, meranie koncentrácie substrátu nebýva zafarbené veľkou chybou merania, koncentrácia biomasy má výrazne vyššiu fluktuáciu. Preto sa najčastejšie z výstupných prúdov meria koncentrácia substrátu.

Aby sme vedeli zhodnotiť kvalitu prístupu k optimalizácii nášho zariadenia použitím hybridných modelov, porovnáme tento prístup s ďalšími dvoma metódami. Sú nimi dvojkroková optimalizácia a schéma úpravy modifikátora. Oba tieto prístupy patria k iteračným metódam.

Dvojkroková optimalizácia.

V prvej fáze sa zameriame na odhad parametrov nominálneho modelu (viď kap. 3.2.1). Treba si uvedomiť, že nepotrebujeme odhadovať všetky parametre modelu, pretože niektoré z nich vieme získať meraním ako jednotlivé výťažky Y_x, Y_p , rýchlosť tvorby produktu ν , koncentráciu substrátu na vstupe s_{in} . Tieto parametre si vopred zadefinujeme a budú mať takú veľkosť, ako udáva Tabuľka 4.3. Zvyšné parametre modelu, maximálnu špecifickú rýchlosť rastu μ_m , Michaelisovu konštantu K_M a koeficient inhibície K_I , tzv. kinetické členy, budeme odhadovať. Na základe nameraných údajov zo skokovej zmeny môžeme zvoliť dve cesty.

V prípade, že disponujeme dátami koncentrácie biomasy aj substrátu, môžeme optimalizačný problém odhadu parametrov sformulovať nasledovne

$$\begin{aligned}
 \min_{\mu_m, K_M} \quad & \sum_{i=1}^N (\Delta_i - (\mu(\tilde{s}_i) - D) \tilde{x}_i)^2, \\
 \text{s.t.} \quad & \Delta_i = \frac{\tilde{x}_i - \tilde{x}_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} \\
 & \mu(\tilde{s}_i) = \mu_m \frac{\tilde{s}_i}{K_M + \tilde{s}_i + \frac{\tilde{s}_i^2}{K_I}}
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

pre všetky $i \in \{1, 2, 3, \dots, N\}$, kde $\tilde{x}_i$ predstavuje nameranú hodnotu koncentrácie biomasy v i -tom kroku v čase t_i , $\tilde{s}_i$ substrátu a Δ_i predstavuje spätnú diferenciu v i -tom kroku. Táto metóda aproximuje údaje o derivácii časového priebehu koncentrácie biomasy. Najväčšou prekážkou pre takýto prístup je samotný šum merania a čím väčší bude jeho rozptyl, tým ďalej budeme od skutočnej derivácie. Na druhej strane ide o relatívne jednoduchú metódu, hlavne čo sa výpočtových nárokov týka, a tým dokážeme obísť problematiku veľkého množstva údajov.

Druhý prístup odhaduje parametre samotných diferenciálnych rovníc nominálneho modelu na základe nameraných údajov koncentrácie substrátu $\tilde{s}$. Zatiaľ čo formulácia optimalizačného problému sa príliš nezmení, zložitosť výpočtu sa výrazne zvýši. V tomto prípade je nutné, v každom nameranom bode, niekoľkokrát numericky vyhodnotiť priebehy koncentrácie biomasy aj substrátu a porovnať ich s nameraným signálom tak, aby sme získali optimálne riešenie. Túto problematiku by sme mohli sformulovať nasledovne

$$\begin{aligned}
 \min_{\mu_m, K_M} \quad & \sum_{i=1}^N (\tilde{s}_i - s_i)^2, \\
 \text{s.t.} \quad & \dot{s} = D(s_{in} - s) - \frac{1}{Y_x} \mu(s)x - \frac{1}{Y_p} \nu x \\
 & \dot{x} = (\mu(s) - D)x \\
 & \mu(s) = \mu_m \frac{s}{K_M + s + \frac{s^2}{K_I}} \\
 & s(0) = s_0 \\
 & x(0) = x_0
 \end{aligned} \tag{4.26}$$

pre všetky $i \in \{1, 2, 3, \dots, N\}$, kde s_i je koncentrácia substrátu v i -tom kroku vypočítaná na základe nominálneho modelu.

V druhej fáze na základe identifikovaného nominálneho modelu určíme optimálnu rýchlosť riedenia resp. prietok v danom kroku podľa rovnice (4.17). Prvú a druhú fázu budeme cyklicky opakovať na pribúdajúcich dátach, až kým neskonvergujeme ku skutočnému optimálnemu prietoku zariadenia.

Schéma úpravy modifikátora.

Táto metóda upravuje gradient účelovej funkcie (4.17), už identifikovaného nominálneho modelu, na základe nameraných údajov koncentrácie biomasy zo zariadenia. Postupovať budeme nasledovne.

Začneme tým, že si označíme našu účelovú funkciu v k -tom kroku resp. iterácii ako

$$J_k = D_k (1 - \alpha \bar{x}_k). \quad (4.27)$$

Keďže nepoznáme matematický opis skutočného zariadenia a potrebujeme získať informáciu o gradiente jeho účelovej funkcie $\nabla_P J_k$, musíme ho odhadnúť pomocou spätnej diferencie

$$\nabla_P J_k = \frac{J_k - J_{k-1}}{D_k - D_{k-1}} = \frac{(D_k - D_k \alpha \hat{x}_k) - (D_{k-1} - D_{k-1} \alpha \hat{x}_{k-1})}{D_k - D_{k-1}} \quad (4.28)$$

kde $\hat{x}$ sú namerané údaje ustáleného stavu koncentrácie biomasy v k -tom resp. $k-1$ kroku pri príslušnej zriedovacej rýchlosti D_k a D_{k-1} . Úprava modifikátora, ako to definuje rovnica (3.6), je daná rozdielom gradientov účelových funkcií zariadenia $\nabla_P J_k$ a nominálneho modelu $\nabla_N J_k$

$$\Delta_k = \nabla_P J_k - \nabla_N J_k. \quad (4.29)$$

Gradient účelovej funkcie nominálneho modelu získame deriváciou rovnice (4.27) podľa rýchlosti riedenia D

$$\nabla_N J = 1 - \alpha \left(\bar{x} + D \frac{\partial \bar{x}}{\partial D} \right), \quad (4.30)$$

kde

$$\frac{\partial \bar{x}}{\partial D} = \frac{\left(\frac{D}{Y_x} + \frac{\nu}{Y_p} \right) (\bar{s} - s_{in} + D \frac{\partial \bar{s}}{\partial D}) - \frac{D(\bar{s} - s_{in})}{Y_x}}{\left(\frac{D}{Y_x} + \frac{\nu}{Y_p} \right)^2}, \quad (4.31)$$

$$\frac{\partial \bar{s}}{\partial D} = f(D, K_M, K_I, \mu_m), \quad (4.32)$$

kde $\frac{\partial \bar{s}}{\partial D}$ sme ponechali vo všeobecnom tvare kvôli zložitosti výrazu a ustálené hodnoty koncentrácie biomasy $\bar{x}$ a substrátu $\bar{s}$ sú definované vzťahmi (4.15) a (4.14). Je zrejmé, že gradient tejto funkcie $\nabla_N J_k$ musíme vypočítať na základe rovnakých údajov D_k v kroku k .

Problematickým faktorom pri odhade gradientu účelovej funkcie zariadenia je šum merania, ktorý bude vždy prítomný. Preto aktuálnu hodnotu modifikátora v k -tom kroku λ_k nastavíme vhodným váhovaním minulých hodnôt modifikátora λ_{k-1} a aktuálnej hodnoty rozdielu Δ_k tak ako udáva rovnica (3.4)

$$\lambda_k = c \lambda_{k-1} + (1 - c) \Delta_k,$$

kde c je váhový koeficient. Takto vypočítaná hodnota modifikátora λ_k sa pripočíta ku gradientu účelovej funkcie nominálneho modelu $\nabla_N J$, kde po integrácii dostaneme

$$J_k = D (1 - \alpha \bar{x}) + D \lambda_k. \quad (4.33)$$

Optimalizačnú úlohu potom zostavíme na základe tejto upravenej rovnice

$$\begin{aligned}
 \min_D \quad & D(1 - \alpha\bar{x}) + D\lambda_k, \\
 \text{s.t.} \quad & \bar{x} = \frac{D(s_{in} - \bar{s})}{\frac{1}{Y_x}D + \frac{1}{Y_x}\nu} \\
 & \bar{s} = -K_I \frac{(D - \mu_m) + \sqrt{(D - \mu_m)^2 - 4\frac{D^2}{K_I}K_M}}{2D}
 \end{aligned} \tag{4.34}$$

ktorou získame optimálnu rýchlosť riedenia D resp. prietok F v príslušnej iterácii. Na základe ďalších hodnôt o ustálených stavoch aktualizujeme hodnotu modifikátora λ_k , ktorá v ideálnejšom prípade konverguje k hodnote

$$\lambda_k = \nabla_P J(D^*) - \nabla_N J(D^*). \tag{4.35}$$

Ak modifikátor nadobudne túto hodnotu, dosiahli sme optimálny chod zariadenia pri D^* . Treba pripomenúť, že rýchlosť konvergenzie, ako aj jej kvalita, závisia od voľby váhového koeficientu c . Pomalá konvergencia nemusí byť vhodná pre procesy, kde dosiahnutie ustáleného stavu trvá hodiny až dni, ale je presná. Na druhej strane rýchla konvergencia kmitá okolo optimálnej hodnoty a často s veľkou amplitúdou.

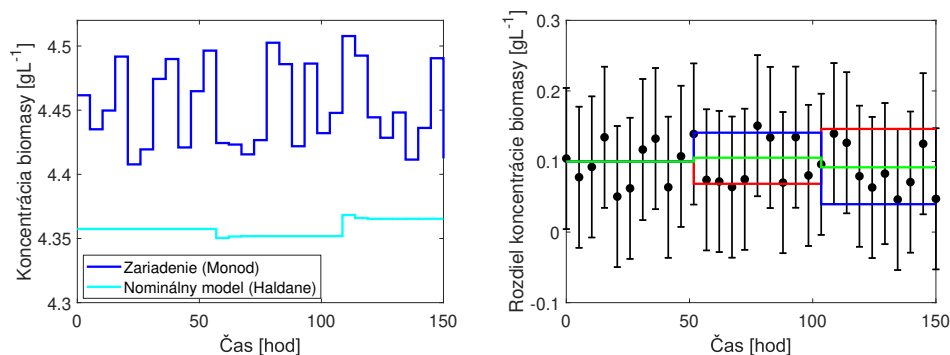
5.1 Trénovanie dátových modelov

Na začiatku sa náš systém nachádza v ustálenom stave, ktorý je definovaný optimálnou rýchlosťou riedenia nominálneho modelu $D_N^* = 0.376\text{h}^{-1}$. Údaje o koncentrácii substrátu a biomasy sme schopný zbierať každých 5 hodín po dobu 50 hodín (za tento čas sa systém dostane do ustáleného stavu po skokovej zmene). Na základe získaných dát zo zariadenia a nominálneho modelu vieme skonštruovať údaje o rozdieloch koncentrácie substrátu Δ_s alebo biomasy Δ_x a na týchto dátach môžeme identifikovať FIR alebo ARX model. Aby sme sa vyhli modelom zbytočne vysokého rádu, zvolili sme pri identifikácii metódou garantovaného odhadu parametrov chybu modelu rovnú dvojnásobku rozptylu šumu.

V počiatočnom ustálenom stave by mal byť priebeh rozdielov koncentrácie biomasy aj substrátu konštantný, takže najjednoduchší FIR model, ktorý dokáže takéto dáta opísať je model prvého rádu a modely vyššieho rádu tým pádom neprichádzajú v úvahu. Výsledky identifikácie FIR modelov, ako aj ARX modelov, demonštrujeme na dátach v 3. iterácii optimalizačného procesu. Dôvodom je, že identifikácia modelu je kvalitnejšia pri väčšom počte údajov a v tomto bode sa objavila aj výraznejšia skoková zmena, v prípade údajov substrátu.

Zamerajme sa najskôr na hybridný model, ktorý koriguje hodnoty koncentrácie biomasy. Výstupné údaje zo zariadenia a nominálneho modelu, môžeme vidieť na Obr. 5.1a a podobne aj dáta rozdielov, ktoré sú zobrazené na Obr. 5.1b.

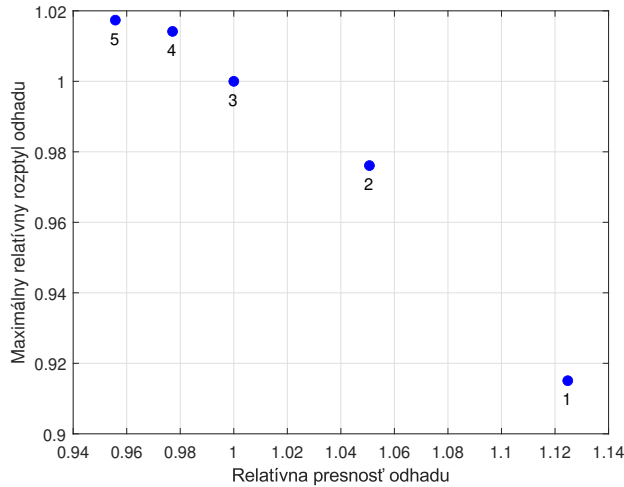
Výsledok určenia minimálneho rádu FIR modelu v tretej iterácii pomocou GOP bol podobný ako v predchádzajúcich iteráciách. Najjednoduchší model, ktorý dokáže tieto dáta opísať, v rámci stanovenej chyby modelu ($\delta_x = \pm 0.1\text{gL}^{-1}$), je model prvého rádu. Na rozdiel od prvej iterácie, teraz je už nutné vyhodnotiť kvalitu tohto modelu a porovnať ju s modelmi vyššieho rádu. Na tento účel využijeme Pareto front, ktorý



(a) Časový priebeh koncentrácie biomasy. (b) Porovnanie nameraných údajov a výstupov z FIR modelu.

Obr. 5.1: Identifikácia FIR modelu metódou garantovaného odhadu parametrov v tretej iterácii. Zobrazené sú namerané údaje (čierna), výstup FIR modelu identifikovaného MNS (zelená) a garantovaná oblasť výstupov FIR modelov, ktorá je definovaná minimálnou (červená) a maximálnou (modrá) realizáciou modelu.

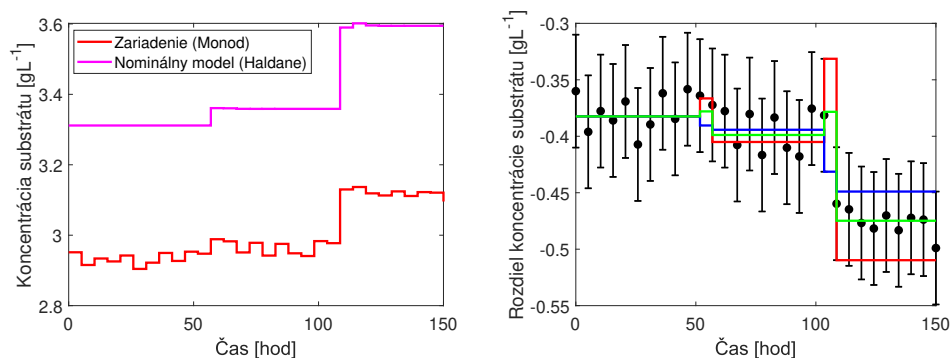
môžeme vidieť na Obr. 5.2. Tento graf vyhodnocuje dve vlastnosti modelov a to presnosť modelu, teda vzdialenosť odhadovanej hodnoty od nameranej, a maximálny rozptyl odhadu, ktorý vyjadruje maximálnu vzdialenosť medzi minimálnou resp. maximálnou realizáciou dátového modelu a odhadovanej hodnoty. Tieto vlastnosti sme vyhodnotili pre sto rôznych realizácií šumu merania a spriemerovali. Výsledné hodnoty sú vzťahované na výsledky dosiahnuté pre model 3. rádu. Čísla pod jednotlivými ukazovateľmi predstavujú FIR model daného rádu. Z Pareto frontu môžeme usúdiť nasledovné. Ak by sme chceli zlepšiť presnosť odhadu zmenou rádu modelu, napr. by sme si zvolili model 2. rádu, získali by sme tým zhoršenie v rozptyle odhadu, ktoré by v tomto prípade bolo kvantitatívne menšie ako zlepšenie v presnosti odhadu. Preto by sa nám oplatilo zvýšiť rád modelu. Na druhej strane by sme sa mali pozrieť aj na absolútne hodnoty týchto vlastností, aby sme vedeli o akom zlepšení resp. zhoršení sa rozprávame. V prípade, že by sme si zvolili namiesto modelu 1. rádu model 5. rádu, dosiahli by sme v priemere zlepšenie presnosti odhadu o 0.0009 g L^{-1} v absolútnych hodnotách. Takáto hodnota nemá v rámci kvality modelu žiadnu váhu a preto môžeme tvrdiť, že rád modelu vhodný na opis nameraných údajov je FIR model 1. rádu. Tento výsledok vôbec nie je prekvapujúci. Je to spôsobené tým, že vplyv šumu merania je výraznejší ako skutočná zmena v koncentrácii biomasy. Vyššie rády modelov by už mohli opisovať šum merania, čo nie je žiadúca vlastnosť dátových modelov.



Obr. 5.2: Pareto front FIR modelov identifikovaných na dátach biomasy. Vlastnosti modelov sú relativizované vzhľadom na model 3. rádu.

V ďalšom kroku musíme zvoliť veľkosť parametrov resp. parametra, ktorý nám zabezpečí, že finálny výstup z FIR modelu bude čo najbližšie ku skutočnému výstupu. Výsledkom garantovaného odhadu parametrov je aj intervalové určenie hodnôt parametrov, ktoré definujú oblasť všetkých možných riešení v rámci stanovenej chyby modelu. V teoretickej časti sme uviedli, že táto oblasť nám garantuje, že skutočné riešenie sa bude nachádzať vo vnútri tohto ohraničenia. Výsledok identifikácie je zobrazený na Obr. 5.1b. Na tomto obrázku môžeme vidieť tri priebehy výstupov, ktoré zodpovedajú FIR modelu 1. rádu – výstup garantovaného odhadu parametrov, t.j. minimálna a maximálna realizácia FIR modelu a výstup získaný identifikáciou FIR modelu metódou najmenších štvorcov (MNS). Keďže aj výstup FIR modelu získaného metódou najmenších štvorcov sa nachádza vo vnútri tejto oblasti, môžeme ho považovať za vhodný na opis nameraných údajov.

V prípade, že by sme identifikovali FIR model na údajoch z rozdielu koncentrácie substrátu zariadenia a nominálneho modelu, prišli by sme k podobnému výsledku. Ale na rozdiel od predchádzajúceho prípadu, potrebujeme na opis nameraných dát v tretej iterácii FIR model 2. rádu, vzhľadom na chybu modelu ($\delta_s = \pm 0.05 \text{ g L}^{-1}$). Tento rozdiel je spôsobený hneď niekoľkými faktormi. Ako možno vidieť na Obr. 5.3a, je tu výrazný rozdiel v kvalite dát – rozptyl šumu nie je tak veľký, aby prekryval samotnú dynamiku procesu, ako tomu bolo v predchádzajúcom prípade. Ďalej si treba uvedomiť, že ide o nelineárny proces, ktorý sa snažíme opísať lineárnym modelom.



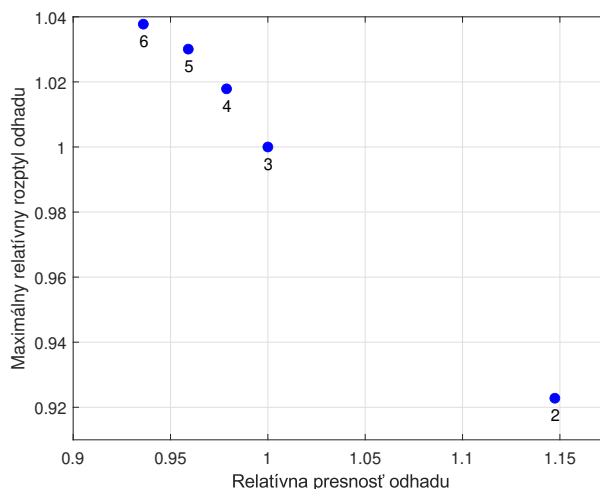
(a) Časový priebeh koncentrácie substrátu. (b) Porovnanie nameraných údajov a výstupov z FIR modelu.

Obr. 5.3: Identifikácia FIR modelu metódou garantovaného odhadu parametrov v tretej iterácii. Zobrazené sú namerané údaje (čierna), výstup FIR modelu identifikovaného MNŠ (zelená) a garantovaná oblasť výstupov FIR modelov, ktorá je definovaná minimálnou (červená) a maximálnou (modrá) realizáciou modelu.

Jediná možnosť, ako sa FIR model dokáže vysporiadať s rozličnou odozvou systému na rovnakú veľkosť vstupnej veličiny, je buď zväčšovaním svojho rádu, alebo zväčšovaním chyby modelu pri identifikácii metódou GOP.

Relevantnosť rádu modelu posúdime pomocou Pareto frontu, ktorý je zobrazený na Obr. 5.3b. Rád FIR modelov je uvedený pod jednotlivými ukazovateľmi, vlastnosti modelov sme vyhodnotili pre sto realizácii šumu a spriemerovali. Nakoniec sme všetky hodnoty vyjadrili a zobrazili ako násobok veľkosti vlastnosti FIR modelu 3. rádu. Ako si môžeme všimnúť, tento Pareto front ukazuje podobné správanie ako ten z Obr. 5.2 – ak by sme chceli zlepšiť presnosť odhadu zvýšením rádu modelu, získali by sme zhoršenie v maximálnom rozptyle odhadu, teda by sa nám rozšíril interval možných hodnôt parametrov. Tak isto by sme mohli uvažovať nad zvýšením rádu modelu, pretože zlepšenie v presnosti odhadu je kvantitatívne väčšie ako zhoršenie rozptylu odhadu. Ale táto zmena v presnosti odhadu by vo väčšine prípadov nebola väčšia ako 0.0006 g L^{-1} v absolútnych hodnotách. Z tohto dôvodu môžeme za vhodný rád modelu označiť FIR model 2. rádu.

Výstupy garantovaného odhadu parametrov FIR modelu môžeme vidieť na Obr. 5.3b. Tak ako v predchádzajúcom prípade sú na obrázku zobrazené výstupy FIR modelu 2. rádu, ktoré zodpovedajú minimálnej a maximálnej realizácii modelu a modelu

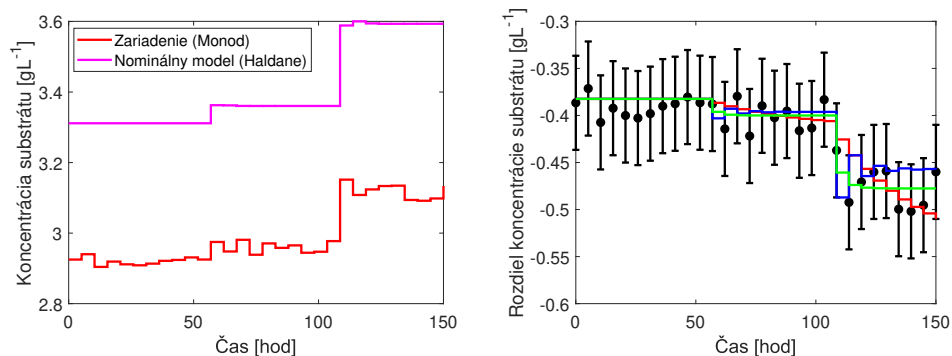


Obr. 5.4: Pareto front FIR modelov identifikovaných na dátach substrátu. Údaje o modeloch sú relativizované vzhľadom na model 3. rádu.

identifikovaného pomocou metódy najmenších štvorcov. FIR model identifikovaný MNŠ sa opäť nachádza vo vnútri garantovanej oblasti a preto ho môžeme považovať za vhodný na opis nameraných údajov.

Mali by sme spomenúť, že pri voľbe dátových modelov sa až tak nesústredíme na samotný opis dynamiky ako na predikciu ustáleného stavu. Pretože tú potrebujeme na úpravu ustálených stavov nominálneho modelu v účelovej funkcii, ktorú dynamika dátového modelu nezmení. Z tohto dôvodu sa nebudeme až tak dopodrobna zaoberať identifikáciou ARX modelu, ktorý na jednej strane dokáže výrazne lepšie a v kompaktnejšej forme opísať dynamiku procesov, ale na druhej strane predikcia ustálených stavov sa takmer nelíši od FIR modelu. Avšak, z dôvodu kompletnosti výsledkov si ukážeme výsledok identifikácie ARX modelu v tretej iterácii optimalizačného procesu ale iba na dátach substrátu. Tie sú jednak informačne výdatnejšie a pri reálnych zariadeniach sa väčšinou meria iba táto veličina (kvôli už spomínaným problémom s meraním koncentrácie biomasy).

Najjednoduchší ARX model, ktorým vieme opísať rozdiel priebehov nameranej koncentrácie substrátu zariadenia a vygenerovanej koncentrácie substrátu nominálneho modelu z Obr. 5.5a, predstavoval diferenčnú rovnicu systému prvého rádu, t.j. polynóm 1. stupňa v čitateli aj menovateli. Výsledok identifikácie metódou garantovaného odhadu parametrov ARX modelu spolu s nameranými údajmi môžeme vidieť na Obr.



(a) Časový priebeh koncentrácie substrátu. (b) Porovnanie nameraných údajov a výstupov ARX modelu.

Obr. 5.5: Identifikácia ARX modelu metódou garantovaného odhadu parametrov v tretej iterácii. Zobrazené sú namerané údaje (čierna), výstup ARX modelu identifikovaného MNŠ (zelená) a garantovaná oblasť výstupov ARX modelov, ktorá je definovaná minimálnou (červená) a maximálnou (modrá) realizáciou modelu.

5.5b. Dynamika ARX modelu je výrazne komplexnejšia v porovnaní s FIR modelom a pravdepodobne lepšie opisuje skutočnosť ako FIR model, ale ako sme už uviedli, odhad ustálených stavov je porovnateľný.

Problematiku identifikácie dátových modelov, pomocou metódy garantovaného odhadu parametrov, by sme mohli zhrnúť nasledovne. Zatiaľ čo väčšina metód nerieši problematiku voľby rádu modelu, ktorá je dôležitou súčasťou identifikácie dátových modelov a výrazne komplikovanejšou úlohou než odhad parametrov modelov, GOP nám ponúka informácie o minimálnom ráde modelu. V spojení s Pareto frontom dokážeme posúdiť aj kvalitu modelov vyššieho rádu a na základe výsledkov môžeme určiť vhodný rád modelu. V ďalšej časti identifikácie pomocou GOP získavame oblasť všetkých možných riešení, v rámci stanovenej chyby modelu. Táto oblasť, ktorá je určená minimálnou a maximálnou realizáciou modelov, nám zaručuje, že skutočné riešenie leží vo vnútri. Naším cieľom by mala byť snaha o zmenšenie tejto oblasti na čo najmenšiu možnú hodnotu (sme však limitovaný chybou merania), čím si zaručíme presnejší výsledok. To dokážeme spraviť voľbou rádu modelu (maximálny rozptyl odhadu) a chyby modelu.

Ukázali sme, že dokážeme nájsť vhodné dátové modely, či už FIR alebo ARX, na opis údajov, ktoré vyjadrujú rozdiel koncentrácie biomasy alebo substrátu medzi skutočným zariadením (Monod model) a nominálnym modelom (Haldane model). Dynamika

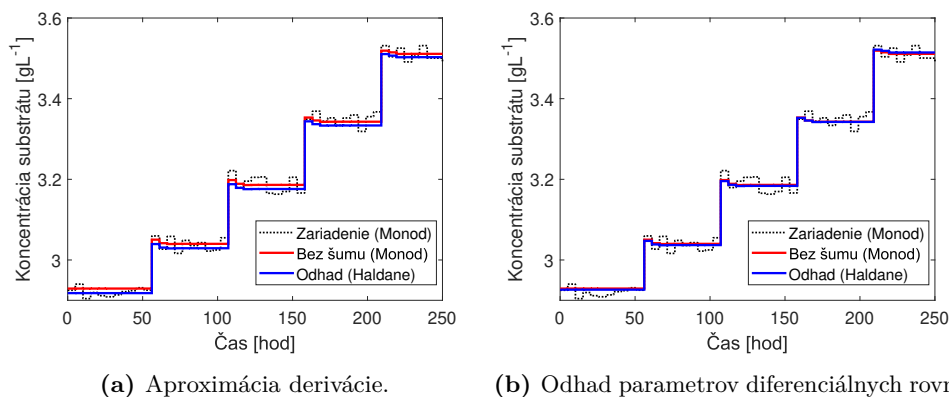
týchto modelov bola odlišná, ale v predikcii ustálených stavov boli FIR aj ARX model rovnako dobré. Z tohto dôvodu sme sa rozhodli, že pri konštrukcii hybridných modelov budeme používať výlučne FIR modely. V prípade, že by sme sa zoberali riadením pomocou hybridných modelov, stálo by za zváženie, či radšej neuprednostníť ARX model, ale to by mohlo byť cieľom ďalšieho výskumu.

5.2 Korekcia optima nominálneho modelu

V tomto okamihu už máme pripravené dátové modely, ktoré môžeme použiť na úpravu nominálneho modelu štýlom ako uvádza rovnica 4.24 resp. 4.21. Než si však ukážeme výsledky prístupu využitím hybridných modelov, poďme sa pozrieť, ako dokážu problematiku optimalizácie zariadenia s nesprávnym mechanistickým modelom vyriešiť spomínané dva prístupy – dvojkroková optimalizácia a schéma úpravy modifikátora. Výsledky potom porovnáme s hybridnými modelmi.

5.2.1 Dvojkroková optimalizácia

V teoretickej časti sme spomenuli, že k odhadu parametrov nominálneho modelu môžeme pristupovať dvojako a na základe dát, ktoré máme k dispozícii. Aproximácia derivácie nutne potrebuje údaje o koncentrácii ako biomasy tak aj substrátu, presne ako uvádza rovnica (4.25). Výsledky takéhoto odhadu parametrov môžeme vidieť na Obr. 5.6a. Tento obrázok zobrazuje priebeh koncentrácie substrátu nominálneho modelu (modrá) na základe nameraných údajov zo zariadenia (čierna) a tak isto priebeh zo zariadenia bez vplyvu šumu (červená) pri viacerých skokových zmenách. Ako môžeme pozorovať, tak takýto prístup k odhadu parametrov dokáže celkom dobre aproximovať dynamiku systému, ale v odhade ustálených stavov sú nedostatky. Pri aproximácii derivácie sú dva faktory, ktoré nám v tomto prípade môžu ovplyvniť samotný výsledok. V prvom rade je to šum merania, ktorý svojou vlastnou dynamikou prekrýva dynamiku systému. V druhom rade ide o samotnú periódu vzorkovania. Je jasné, že spätná diferencia bude zodpovedať derivácii práve vtedy, ak sa perióda vzorkovania bude limitne blížiť k nule a to nedokážeme dosiahnuť pri biochemickom reaktore. V reálnom zariadení by sme koncentráciu substrátu teoreticky vedeli merať častejšie, problematické je však meranie koncentrácie biomasy, ktorá sa bežne ani nemeria. Z tohto dôvodu sme demonštrovali ďalší prístup k odhadu parametrov, ktorý využíva iba údaje o koncentrácii substrátu a na základe týchto dát odhaduje parametre modelu tak ako uvádza rovnica (4.26). Takýto prístup je výrazne lepší a dokáže odhadnúť neznáme parametre nominálneho modelu, ktorý sa nezhoduje so zariadením, tak, aby identifikovaný model dokázal opísať skutočnosť, ako zobrazuje Obr. 5.6b.



Obr. 5.6: Porovnanie prístupov k odhadu parametrov Haldane modelu na základe nameraných údajov zo zariadenia (Monod) pri viacerých skokových zmenách $D = \{D_N^*, 0.38, 0.385, 0.39, 0.395\} \text{h}^{-1}$.

Jasnou výhodou je, že koncentráciu substrátu dokážeme merať častejšie a s menšou fluktuáciou ako v prípade biomasy.

Dvojkrová optimalizácia prebieha v dvoch fázach. Prvou je odhad parametrov nominálneho modelu na základe nameraných údajov zo zariadenia a v druhej fáze využívame tento model pri optimalizácii ustálených stavov zariadenia. Kvôli jasným výhodám, ktoré sme vyššie uviedli, budeme k odhadu parametrov pristupovať druhým spôsobom, teda tak ako uvádza rovnica (4.26).

Už Obr. 5.6b napovedal, že existuje kombinácia odhadovaných kinetických parametrov μ_m, K_M, KI nominálneho modelu, ktorá dokáže simulovať naše zariadenie, a tým pádom vie predikovať správne hodnoty ustálených stavov. Tento fakt dokazuje aj Obr. 5.7a. Na ňom vidíme priebeh hodnôt účelovej funkcie Monod modelu, teda reálneho zariadenia, počas jednotlivých iterácií. Ako môžeme sledovať, tak už v 5–6 iterácii dosiahne nominálny model optimálny stav zariadenia. Na ostatných obrázkoch 5.7b, 5.7c, 5.7d sú zobrazené hodnoty odhadnutých parametrov v jednotlivých iteráciách a bodkovane sú vyznačené parametre Monod modelu (v prípade maximálnej špecifickej rýchlosti rastu μ_m a Michaelisovej konštanty K_M), ale aj Haldane modelu, ktorým je určená začiatočná rýchlosť riedenia D_N^* .

Nie je prekvapujúce, že iba na základe odhadu parametrov nepresného nominálneho modelu, sme dosiahli optimálnu prevádzku zariadenia. Je to spôsobené tým, že Monod aj Haldane modely sú si veľmi podobné. Jediný rozdiel medzi nimi je v špecifickej

rýchlosti rastu $\mu(s)$, kde Haldane model obsahuje v menovateli člen $\frac{s^2}{K_I}$ navyše. Ak by sme limitne šli s inhibičným koeficientom do nekonečna $K_I \rightarrow \infty$, zlomok $\frac{s^2}{K_I}$ by šiel k nule $\frac{s^2}{K_I} \rightarrow 0$, a tým pádom by sme skonvergovali ku Monod modelu. Tento jav môžeme pozorovať na Obr. 5.7d, kedy sa optimalizácia snaží vyrovnať rozdiely medzi modelmi, práve zväčšovaním hodnoty inhibičného koeficientu K_I . Zvyšné dva parametre modelu konvergujú ku skutočným hodnotám zariadenia ako je ukázané na Obr. 5.7b a 5.7c.

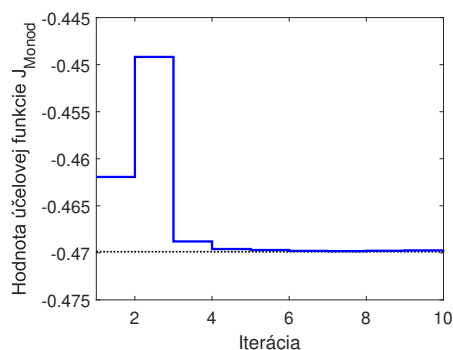
Fakt, že modularita Haldane modelu a podobnosť oboch modelov nám umožnili skonvergovať ku skutočnému optimu zariadenia, je veľmi raritná a pri reálnych procesoch by takáto situácia teoreticky ani nenastala, pretože modelovanie zariadení so živými organizmami je komplikovaná záležitosť a výsledné modely majú zložitejšiu štruktúru ako Monod alebo Haldane model.

5.2.2 Schéma úpravy modifikátora

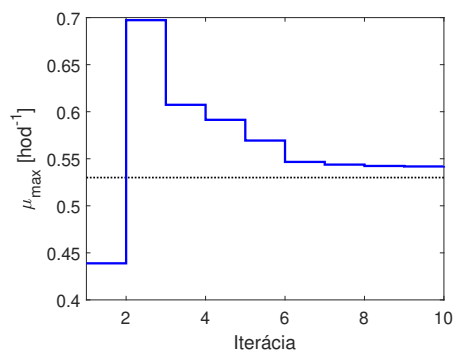
Táto metóda upravuje gradient účelovej funkcie nominálneho modelu na základe odhadnutého gradientu zariadenia, presne ako uvádza rovnica (4.29). Práve s odhadom gradientu môžu nastať komplikácie, najmä kvôli šumu merania. Z tohto dôvodu najskôr demonštrujeme funkčnosť tejto metódy tak, že namiesto odhadnutého gradientu budeme používať skutočný gradient účelovej funkcie zariadenia, teda Monod modelu.

Ako môžeme vidieť na Obr. 5.8a, tak takýto prístup dokáže zabezpečiť, že za určitý počet iterácií dosiahneme optimálnu prevádzku zariadenia. Na tomto obrázku sú znázornené priebehy optim upravenej účelovej funkcie, ktoré sú vyjadrené ako hodnoty účelovej funkcie zariadenia, pri rôznych váhových koeficientoch c . Všimnime si, že rýchlosť konvergenzie závisí od veľkosti váhového koeficientu c . Ak sa pozrieme na rovnicu (3.6), vidíme, že čím menšia je hodnota c tak, tým viac nových informácií o gradiente vkladáme do modifikátora λ . Na vedľajšom obrázku 5.8b sú znázornené príslušné priebehy hodnôt modifikátora v jednotlivých iteráciách. Z tohto obrázka je zrejmé, že ak modifikátor nadobudne hodnotu, ktorá je zobrazená bodkovane a je definovaná rovnicou (4.35), dosiahneme optimum zariadenia. Tento fakt možno sledovať aj na Obr. 5.9, ktorý zobrazuje hodnoty účelových funkcií zariadenia, nominálneho modelu a upravenej účelovej funkcie pri rôznych rýchlostiach riedenia D . Na tomto obrázku môžeme vidieť, že úprava gradientu účelovej funkcie nominálneho modelu, stačí na dosiahnutie optimálnej prevádzky.

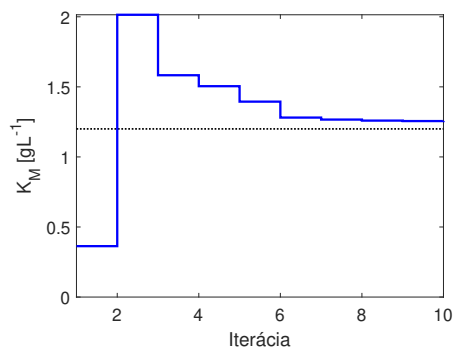
Pozrime sa teraz, ako by sa zmenila situácia, ak by sme skutočný gradient vymenili za odhadnutý. Výsledky tejto simulácie môžeme vidieť na Obr. 5.10a a 5.10b, ktoré zobrazujú, podobne ako v predchádzajúcom prípade, riešenia upravenej optimalizačnej



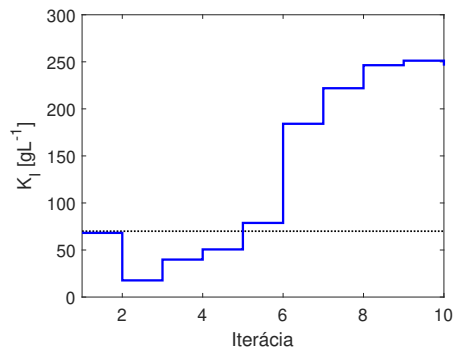
(a) Optimá nominálneho modelu zobrazené ako hodnoty účelovej funkcie Monod modelu (zariadenia).



(b) Maximálna špecifická rýchlosť rastu.

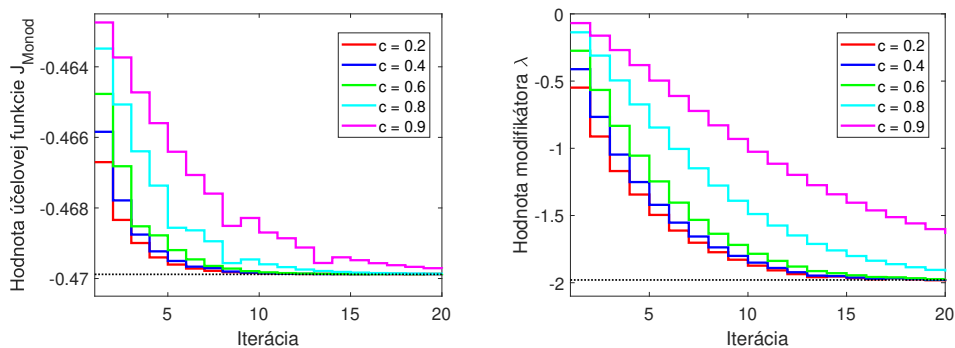


(c) Michaelisova konštanta.



(d) Koeficient inhibície.

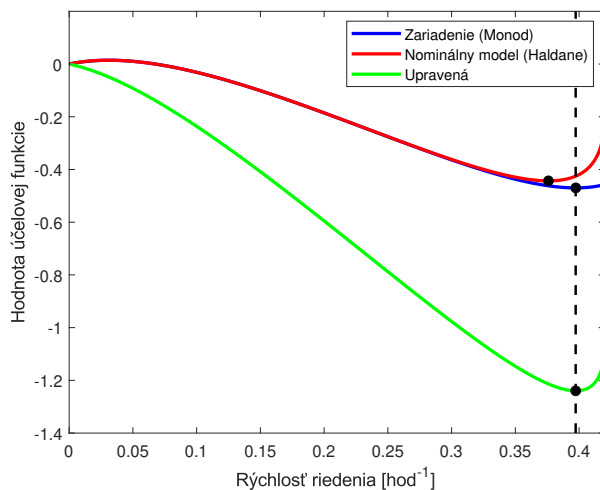
Obr. 5.7: Priebeh optím Monod modelu vyjadrených ako hodnoty účelovej funkcie Monod modelu (zariadenia) a parametrov nominálneho modelu v jednotlivých iteráciách. Bodkovaná čiara znázorňuje hodnotu účelovej funkcie v optime zariadenia (a), alebo hodnoty parametrov pôvodného nastavenia nominálneho modelu (a, b, c) resp. zariadenia (b, c).



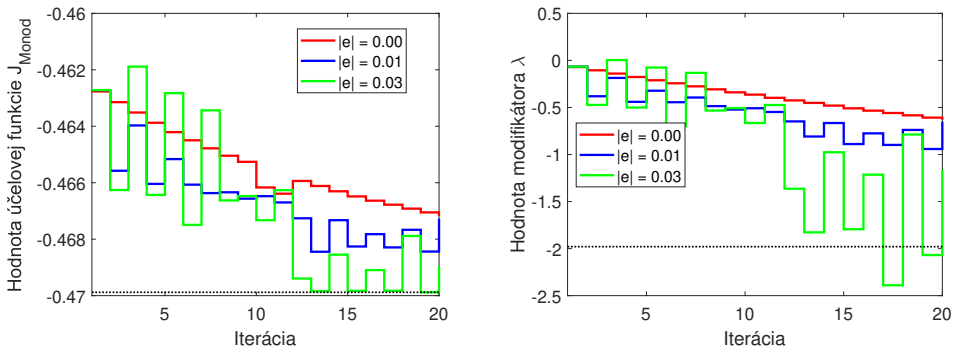
(a) Optimálna upravená účelová funkcia vyjadrená ako hodnoty účelovej funkcie Monod modelu (zariadenia).

(b) Priebeh hodnôt modifikátora.

Obr. 5.8: Priebeh schémy úpravy modifikátora s využitím skutočného gradientu účelovej funkcie pri rôznych hodnotách váhových koeficientov c .



Obr. 5.9: Porovnanie účelových funkcií a ich optím.



(a) Optimá upravenej účelovej funkcie vyjadrené ako hodnoty účelovej funkcie Monod modelu (zariadenia).

(b) Priebeh hodnôt modifikátora.

Obr. 5.10: Priebeh schémy úpravy modifikátora s využitím odhadu gradientu účelovej funkcie pri rôznom rozptyle šumu merania $|e|$ a hodnote váhového koeficientu $c = 0.945$.

úlohy, vyjadrené ako hodnoty účelovej funkcie Monod modelu a priebeh príslušných hodnôt modifikátora v jednotlivých iteráciách pri rôznej maximálnej hodnote šumu merania $|e|$. Ako si môžeme všimnúť, tak vplyv šumu merania je zrejmy a môže pôsobiť dvojako. Na jednej strane môže zabezpečiť rýchlejšiu konvergenciu ako je tomu na Obr. 5.10. Na druhej strane, ak rozdiel v hodnotách ustálených stavov je porovnateľný alebo menší ako vplyv šumu, vznikajú oscilácie, a tým sa znemožňuje presná konvergencia. Amplitúdu oscilácií môžeme tlmieť zväčšovaním hodnoty váhového koeficientu c , ale to znamená veľmi pomalú konvergenciu. V horšom prípade, ak odhadnutý gradient nadobudne rádovo väčšiu hodnotu od skutočného, pozmení tým aj hodnotu modifikátora, ktorá sa potom bude tiež veľmi pomaly vraciť späť na pôvodnú hodnotu. Samozrejme, stále je tu hrozba, že vplyv šumu môže viesť k takým hodnotám modifikátora, ktoré dostanú náš systém do nežiaduceho stavu napr. do výplachu.

Mali by sme pripomenúť ešte zopár technických poznámok. Aby sme rozbehli túto metódu optimalizácie prevádzky zariadenia, potrebujeme mať na začiatku informácie o dvoch skokových zmenách na prvý odhad gradientu resp. výpočet modifikátora. Veľkosť počiatočnej skokovej zmeny je veľmi podstatná, pretože súvisí s počiatočnou hodnotou odhadovaného gradientu a tým ovplyvňuje celkový priebeh optimalizácie, najmä pri vysokých hodnotách váhového koeficientu c . Z tohto dôvodu sme aj my zvolili počiatočnú skokovú zmenu z ustáleného stavu pri $D = 0.1\text{h}^{-1}$ na $D_N^* = 0.376\text{h}^{-1}$, aby sme zabezpečili spoľahlivý počiatočný odhad gradientu. Ďalšia pripomienka, ktorá

stojí za zváženie, je ohraničenie zmeny odhadu gradientu. Kvôli vplyvu šumu, sa môžu dva po sebe idúce odhadnuté gradienty rádovo líšiť. Dôsledok toho je, že to vedie k osciláciám riešenia s veľkou amplitúdou, v horšom prípade to môže spôsobiť problémy pri riešení optimalizačnej úlohy.

Ako sme ukázali, tak metóda úpravy účelovej funkcie nominálneho modelu pomocou modifikátora, môže nájsť optimálny ustálený stav zariadenia. Problematickým je vplyv šumu merania, ktorý ak je výraznejší ako samotný rozdiel v skokových zmenách, tak nedokážeme zabezpečiť konvergenciu k optimu. Preto treba vhodne nastaviť parametre tejto metódy, čo vôbec nie je jednoduchá úloha, najmä v prípade biochemického reaktora, kde fluktuácia koncentrácie biomasy je značná.

5.2.3 Použitie hybridných modelov

V predchádzajúcich častiach sme ukázali ako si s problematikou optimalizácie prevádzky zariadenia, pri nepresnom matematickom opise, dokázali poradiť dvojkroková optimalizácia a schéma úpravy modifikátora. Poďme sa pozrieť ako sa s touto problematikou dokáže vysporiadať prístup s použitím hybridných modelov.

V časti “trénovanie dátových modelov” sme identifikovali dva typy FIR modelov – jeden na údajoch rozdielov koncentrácie biomasy a druhý na dátach substrátu. Tieto modely využijeme na úpravu ustálených stavov nepresného mechanistického modelu, pomocou ktorého sa snažíme docieľiť optimálnu prevádzku zariadenia. Demonstrujme si najskôr výsledky optimalizácie hybridného modelu odvodeného na dátach biomasy.

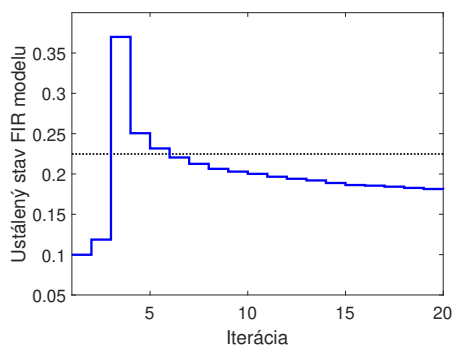
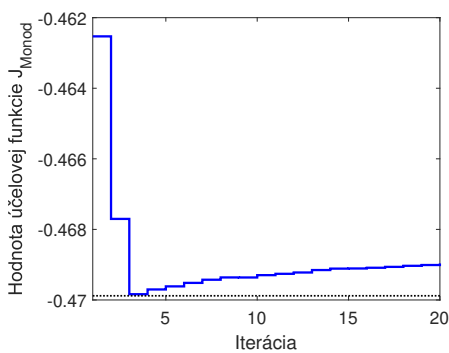
Výsledky priebehu optimalizácie sú zobrazené na Obr. 5.11. Ako si môžeme všimnúť na Obr. 5.11a, kde sú znázornené optimá hybridného modelu vyjadrené ako hodnoty účelovej funkcie zariadenia v jednotlivých iteráciách, tak takýto prístup dostane naše zariadenie v troch krokoch do optimálneho stavu, ktorý je zobrazený bodkovanou čiarou. V neskorších iteráciách sa mení optimum hybridného modelu a ustálený stav nášho zariadenia sa vzdaluje od svojho optimálneho ustáleného stavu. Tento jav je spôsobený tým, že šum merania je omnoho výraznejší ako samotná skoková zmena a preto aj predikovaný ustálený stav nebude tak presný. To môžeme vidieť na Obr. 5.11b, kde v tretej iterácii bol odhadnutý ustálený stav vysoko nadhodnotený. V každej ďalšej iterácii, odhadnutá rýchlosť riedenia D už neprinesie výraznú skokovú zmenu vzhľadom na šum merania, čím sa znižuje aj informačná výdatnosť dát a hodnota predikovaného ustáleného stavu nám klesá. Fakt, že od tretej iterácie nie sú naše dáta informačne výdatné, môžeme sledovať na Obr. 5.11c, kde je zobrazený rád FIR modelu v jednotlivých iteráciách, ktorý sa od tretej iterácie nemení. V opačnom prípade, by so zvyšujúcim sa počtom dát musel rásť aj rád modelu, kvôli nelinearite nášho zariadenia.

V skutočnosti, by sme takýto hybridný model mohli len veľmi ťažko skonštruovať. Fluktuácia koncentrácie biomasy, ktorú by sme namerali v biochemickom reaktore, by bola omnoho väčšia ako uvažujeme my ($|e_x| = 0.05 \text{ g L}^{-1}$). To by viedlo k ešte väčšej nepresnosti predikcie rozdielov ustálených stavov koncentrácie a pri optimalizácii by sme mohli získať také rýchlosti riedenia D , ktoré by dostali naše zariadenia do stavu vymytia. A tak isto, množstvo nameraných údajov by bolo výrazne menšie. Preto si teraz ukážeme výsledky optimalizácie hybridným modelom, odvodeného na dátach koncentrácie substrátu.

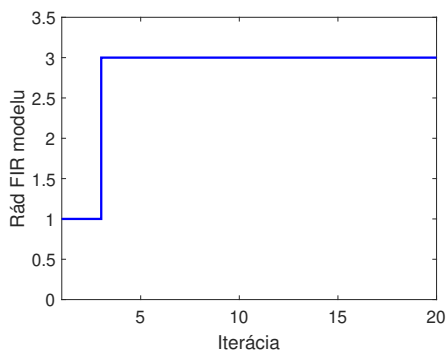
Ako môžeme vidieť na Obr. 5.12a, tak takýto hybridný model dokáže skonvergovať do blízkosti optima zariadenia, nie však úplne k nemu. Ale na rozdiel od predchádzajúceho hybridného modelu, po dosiahnutí maxima sa už z neho nepohne a táto stabilita je veľmi dobrá vlastnosť, pretože zaručuje aspoň nejaký výsledok. V ďalších iteráciách, získaná rýchlosť riedenia D už nedokáže vyprodukovať skokovú zmenu, ktorá by výrazne zmenila štruktúru dátového modelu a preto sa dostaneme do ustáleného režimu. Toto potvrdzujú aj Obr. 5.12b a 5.12c, ktoré zobrazujú predikciu ustáleného stavu FIR modelom a jeho rád v jednotlivých krokoch optimalizácie.

Na tomto mieste by sme si mohli položiť otázku “Ktorý z hybridných modelov je lepší?”. Kvôli vplyvu šumu sa hybridný model, založený na korekcii koncentrácie biomasy, dostal výrazne bližšie k optimu zariadenia. Na druhej strane, hybridný model, založený na korekcii koncentrácie substrátu, nám dokáže zaručiť stabilnú rýchlosť riedenia D , ktorá je v relatívnej blízkosti od optima zariadenia. Aby sme mohli tieto dva hybridné modely porovnať, zhotovili sme experiment, v ktorom sme zmenili rozptyl šumu merania koncentrácie biomasy ($|e_x| = 0.001 \text{ g L}^{-1}$) tak, aby bol porovnateľný s rozptylom šumu merania koncentrácie substrátu, vzhľadom na skokové zmeny generované v jednotlivých iteráciách. Výsledok tohto experimentu nám ukázal, že oba hybridné modely konvergujú k rovnakým hodnotám, ako môžeme vidieť na Obr. 5.13, ale hybridnému modelu, založenom na úprave koncentrácie biomasy, to trvá o niekoľko iterácií dlhšie. Je to spôsobené najmä tým, že dynamika priebehu koncentrácie biomasy nie je tak výrazná ako priebeh koncentrácie substrátu. Ako sme už vyššie uviedli, tak s touto veličinou je spojených viacero problémov a z tohto dôvodu budeme ďalšie výsledky vzťahovať výlučne na hybridný model substrátu.

Zistili sme, že iteračným prístupom sa dokážeme dostať iba do blízkeho okolia optimálneho ustáleného stavu zariadenia, nedokážeme však odhadnúť samotné optimum. Preto si dovoľme tvrdiť, že iteračný prístup v spojení s hybridným modelovaním nie je najlepšou voľbou optimalizácie prevádzky zariadenia. Ale k optimalizácii pomocou

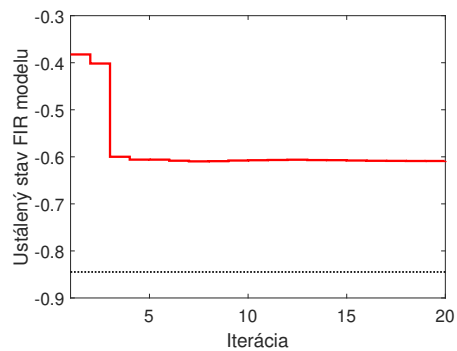
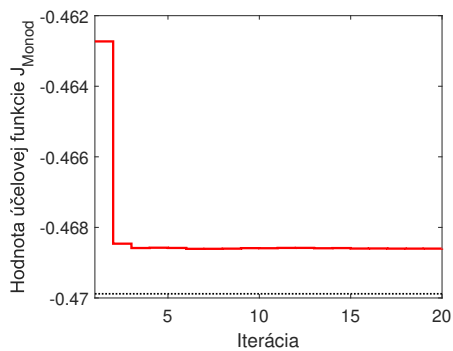


- (a) Optimá hybridného modelu vyjadrené ako hodnota účelovej funkcie Monod modelu (zariadenia). (b) Pribeh predikcie ustáleného stavu FIR modelom.

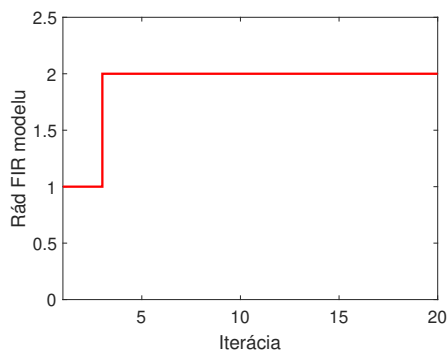


- (c) Pribeh rádu FIR modelu.

Obr. 5.11: Výsledok optimalizácie pomocou hybridného modelu, identifikovaného na dátach rozdielov koncentrácie biomasy medzi zariadením a nepresným mechanistickým modelom.

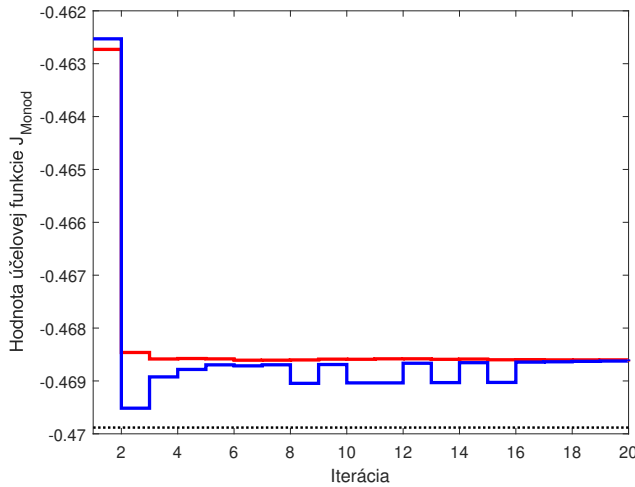


- (a) Optimá hybridného modelu vyjadrené ako hodnota účelovej funkcie Monod modelu (zariadenia). (b) Priebeh predikcie ustáleného stavu FIR modelom.



- (c) Priebeh rádu FIR modelu.

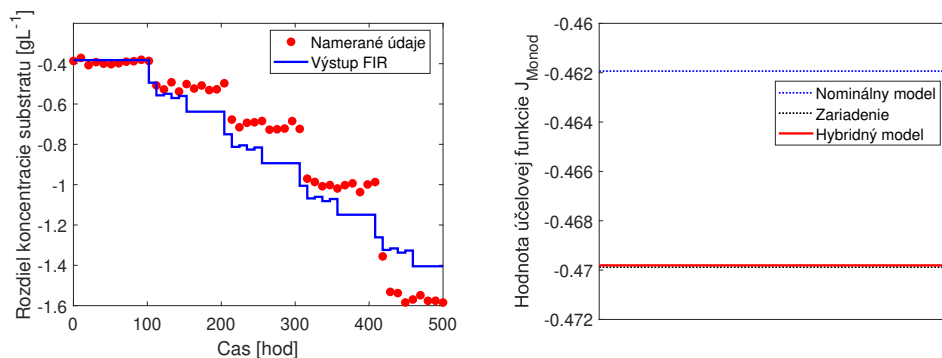
Obr. 5.12: Výsledok optimalizácie pomocou hybridného modelu, identifikovaného na dátach rozdielov koncentrácie substrátu medzi zariadením a nepresným mechanistickým modelom.



Obr. 5.13: Porovnanie výsledkov optimalizácie hybridných modelov biomasy (modrá) a substrátu (červená), vyjadrených ako hodnoty účelovej funkcie Monod modelu (zariadenia). Bodkovanou čiarou je zobrazená skutočná hodnota ustáleného stavu zariadenia.

hybridných modelov môžeme pristupovať ešte iným spôsobom. Dátové časti hybridných modelov majú veľkú výhodu a tou je, že ich môžeme natrénovať na historických údajoch dopredu. Takto už bude mať dátový model nejaké informácie o systéme v sebe uchované. Limitovaný sme iba množstvom dát, ktorým disponujeme a od toho závisí kvalita predikcie modelu.

Predstavme si situáciu, že máme k dispozícii namerané údaje rozdielu koncentrácie substrátu. Tie zodpovedajú piatim skokovým zmenám v rýchlosti riedenia $D = \{0.3760, 0.3845, 0.3930, 0.4015, 0.4100\} \text{h}^{-1}$, kde najnižšia hodnota predstavuje optimálnu rýchlosť riedenia nominálneho modelu D_N^* . Na týchto dátach sme identifikovali pomocou garantovaného odhadu parametrov FIR model. Aby sme sa vyhli modelom zbytočne vysokého rádu, museli sme zmeniť chybu modelu δ_s na osemnásobok rozptylu šumu merania $\delta_s = 0.2 \text{g L}^{-1}$. Takto sme získali FIR model 6. rádu a jeho výstup môžeme vidieť na Obr. 5.14a. Určite sa zhodneme, že takýto FIR model nemá veľa spoločného s realitou, ale ide o krásnu ukážku aproximácie nelineárneho systému lineárnym dátovým modelom. Keď sme takýto model použili na korekciu ustálených stavov koncentrácie substrátu nominálneho modelu pri optimalizácii, získaná rýchlosť riedenia D uviedla naše zariadenie do jeho optimálneho ustáleného stavu, čo môžeme vidieť na Obr. 5.14b.



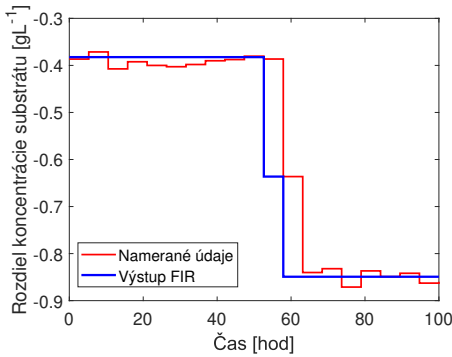
(a) Trénovacie dáta a výstup FIR modelu. (b) Optimá hybridného modelu vyjadrené ako hodnoty účelovej funkcie Monod modelu (zariadenia).

Obr. 5.14: Priebeh optimalizácie zariadenia pomocou hybridného modelovania, ktorého dátová časť bola vopred natrénovaná na dátach z viacnásobnej skokovej zmeny $D = \{0.3760, 0.3845, 0.3930, 0.4015, 0.4100\} \text{h}^{-1}$.

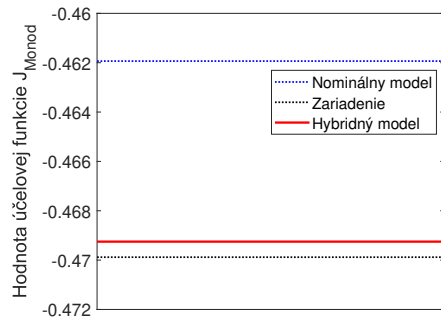
Tento prístup má jednu veľkú výhodu oproti iteračnému prístupu a tým je, že optimalizáciu prevádzky biochemického reaktora sme boli schopný vykonať v jednom kroku. Avšak, ak by sme takýto model zapojili do iteračného prístupu, s veľkou pravdepodobnosťou by sme sa vzdiali od optima zariadenia. Tento fakt sme uviedli bez dôkazu, ale dôvod tohto správania si vysvetlíme na nasledujúcom príklade.

Predstavme si teraz situáciu, že poznáme optimálnu rýchlosť riedenia zariadenia D_P^* . Ak spravíme skokovú zmenu z hociktorého ustáleného stavu na optimálnu hodnotu zariadenia, mali by sme získať presný rozdiel v koncentrácii substrátu, ktorý by nás z daného ustáleného stavu mal dostať do optimálneho stavu zariadenia. Pokúsme sa na týchto dátach natrénovať dátovú časť hybridného modelu a pozrime sa ako dopadne optimalizácia prevádzky zariadenia.

Vykonalí sme skokovú zmenu z ustáleného stavu nominálneho modelu pri rýchlosti riedenia $D_N^* = 0.3760 \text{h}^{-1}$ na hodnotu zodpovedajúcu optimálnej prevádzke zariadenia $D_P^* = 0.3974 \text{h}^{-1}$, ako uvádza Obr. 5.15a. Skutočný rozdiel v koncentrácii ustálených stavov substrátu pri tejto rýchlosti riedenia by bol $\Delta_s = -0.8448 \text{g L}^{-1}$ a FIR model identifikovaný pomocou týchto dát predikoval hodnotu rozdielu ustáleného stavu $\Delta_s^{FIR} = -0.8492 \text{g L}^{-1}$. Ak máme k dispozícii presný rozdiel ustáleného stavu koncentrácie substrátu pri optimálnej rýchlosti riedenia zariadenia D_P^* , tak účelová funkcia hybridného modelu a zariadenia musia mať spoločný prienik v optime a to



(a) Trénovacie dáta.

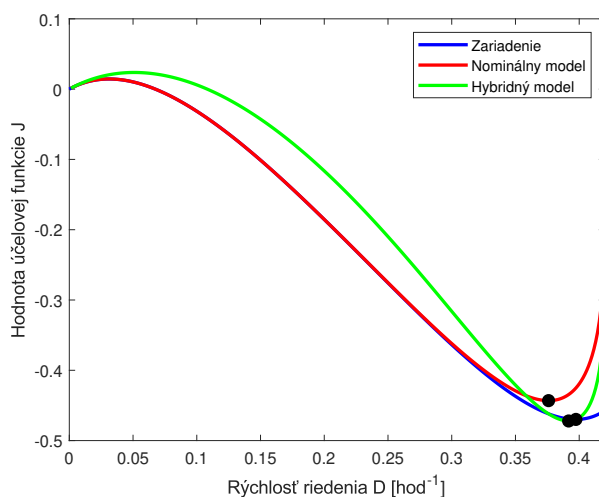


(b) Optimá vyjadrené ako hodnota účelovej funkcie Monod modelu (zariadenia).

Obr. 5.15: Porovnanie optimí a účelových funkcií Monod (zariadenia) a hybridného modelu, ktorý bol identifikovaný na dátach zo skokovej zmeny $D_N^* \rightarrow D_P^*$.

môžeme vidieť na Obr. 5.16. Avšak, optimum hybridného modelu nedosiahlo hodnotu optimálnej prevádzky zariadenia ako môžeme vidieť na Obr. 5.15b. Dôvodom je, že korekcia ustáleného stavu nepresného mechanistického modelu pomocou dátového modelu, štýlom aký uvádza rovnica (4.21) resp. (4.24), neupravuje účelovú funkciu resp. jej gradient, dostatočne na to, aby sme dosiahli skutočné optimum zariadenia, ako môžeme vidieť na Obr. 5.16, ale postačuje na to, aby sme sa dostali do veľmi blízkeho okolia optima.

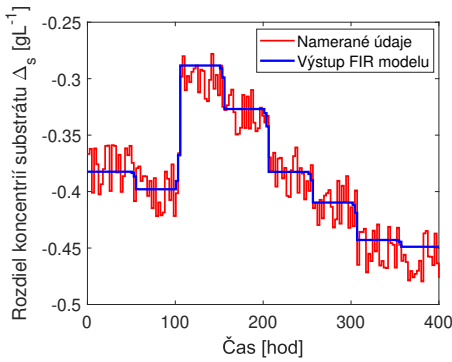
Mali by sme spomenúť, že hybridné modely disponujú aj predikčnými vlastnosťami, a tým pádom dokážu omnoho lepšie odhadovať výstupy zo skutočného zariadenia ako samotný nominálny model. Spravme nasledovný experiment. Nechajme schému úpravy modifikátora riešiť optimalizáciu do takej iterácie, aby nedosiahla optimum zariadenia (v našom prípade do 8. iterácie). Ná týchto dátach identifikujeme FIR model pomocou garantovaného odhadu parametrov a využijeme ho na odvodenie hybridného modelu. Trénovacie údaje sú zobrazené na Obr. 5.17a, kde môžeme vidieť aj výstup identifikovaného FIR modelu 3. rádu. Aby sme otestovali predikciu hybridného modelu, zvolili sme si tri rôzne rýchlosti riedenia. Dve také, ktoré boli zahrnuté v dátach na tréning modelu a jednu novú, optimálnu rýchlosť riedenia nášho zariadenia D_P^* , ktorá už v dátach obsiahnutá nebola. Ak testovacie dáta boli obsiahnuté v dátach na tréning, tak výstup z hybridného modelu dokázal veľmi presne odhadnúť skutočný výstup zo zariadenia. Na druhej strane, ak sme mu ponúkli ešte nepoznané vstupné dáta, vznikla nám odchýlka, ktorá je stále menšia ako odchýlka nominálneho modelu od zariadenia. Treba si uvedomiť, že kvalita hybridného modelu je určená kvalitou



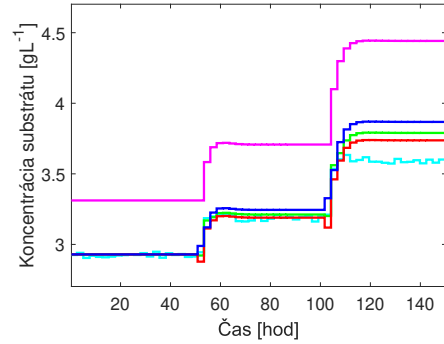
Obr. 5.16

dátového modelu. To znamená, že čím lepší bude dátový model, tým lepšiu predikciu dosiahneme a vďaka garantovanej oblasti vidíme, že určité nedostatky v predikcii by sme mohli ešte zlepšiť. Na základe týchto faktov si dovoľíme tvrdiť, že v oblasti riadenia by hybridné modely našli omnoho väčšie uplatnenie ako pri statickej optimalizácii.

Výsledky experimentov nás priviedli k záveru, že hybridné modelovanie môže byť použité na optimalizáciu prevádzky biochemického reaktora. Uviedli sme niekoľko prístupov v rámci hybridného modelovania, ktoré sa dajú aplikovať na túto problematiku. Iteračná metóda dokázala skonvergovať v priebehu pár krokov, ale dostala sa iba do okolia optima. Ak sme dátovú časť hybridného modelu natrénovali na dopredu známych dátach, tak sme sa dostali do presného optimálneho stavu zariadenia. Avšak, je veľmi pravdepodobné, že ak by sme pridali dáta zo skokových zmien pri väčších hodnotách rýchlosti riedenia, ľahko by sme optimálny stav presiahli. Ďalšou nevýhodou tohto prístupu je, že ak by sme vopred natrénovaný model zapojili do iteračnej optimalizácie, tak po niekoľkých iteráciách by sme sa vzdialili od optimálneho ustáleného stavu zariadenia. Je na to hneď niekoľko dôvodov. Jedným je, že po určitom čase nedokážeme iteračným prístupom vygenerovať informačne výdatné dáta na identifikáciu dátového modelu. A druhým je, že aj keby FIR model predikoval presný rozdiel koncentrácie substrátu zariadenia a nominálneho modelu, nikdy by sme nedosiahli skutočné optimum, ako sme ukázali na Obr. 5.16. Ak by sme chceli naše zariadenie dostať do jeho optimálneho stavu, museli by sme pozmeniť štýl, akým pristupujeme ku korekcii nominálneho modelu, napríklad tak, ako to rieši schéma úpravy modifikátora, t.j.



(a) Trénovacie údaje.



(b) Porovnanie dynamiky a predikcie modelov.

Obr. 5.17: Porovnanie predikčných schopností nominálneho a hybridného modelu, ktorý bol identifikovaný pomocou dát získaných schémou úpravy modifikátora. Testovacie vstupné údaje boli $D = \{D_N^*, 0.385, D_P^*\}h^{-1}$. Na obrázku sú znázornené priebehy koncentrácie substrátu zariadenia (tyrkysová), nominálneho modelu (ružová), minimálna (červená) a maximálna (modrá) realizácia hybridného modelu a výstup hybridného modelu identifikovaného MNŠ (zelená).

úpravou gradientu účelovej funkcie nominálneho modelu.

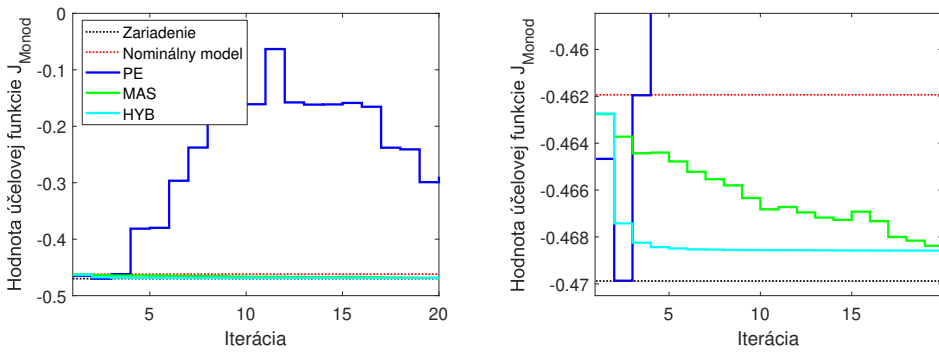
5.2.4 Porovnanie prístupov

Nakoniec by sme mali porovnať jednotlivé prístupy optimalizácie prevádzky zariadenia medzi sebou a zhodnotiť ich výhody aj nevýhody. Na tento účel sme sa rozhodli využiť iteračný prístup k optimalizácii. Experiment sme nastavili podobne ako v predchádzajúcich častiach s tým rozdielom, že v tomto prípade sme experiment vykonali pre 50 rôznych realizácií šumu merania a výsledné riešenia spriemerovali. Rozptyl šumu merania pre koncentráciu biomasy sme nastavili rovný $W_x = 0.03 \text{ g L}^{-1}$ a pre koncentráciu substrátu $W_s = 0.025 \text{ g L}^{-1}$. Pri schéme úpravy modifikátora sme zvolili váhový koeficient $c = 0.8$ a pri identifikácii FIR modelu sme nastavili chybu modelu rovnú dvojnásobku rozptylu šumu merania $\delta_s = 0.05 \text{ g L}^{-1}$. Pri dvojkrokovej optimalizácii sme zvolili počiatočný nástrel odhadovaných parametrov nasledovne $\mu_m = 0.5 \text{ h}^{-1}$, $K_M = 1.0 \text{ g L}^{-1}$, $K_I = 50.0 \text{ g L}^{-1}$.

Výsledok tohto porovnania môžeme vidieť na Obr. 5.18a resp. na Obr. 5.18b, ktoré zobrazujú priebeh výsledkov optimalizácie prevádzky zariadenia troch prístupov – dvojkroková optimalizácia, schéma úpravy modifikátora a hybridné modelovanie – vyjadrených ako hodnoty účelovej funkcie Monod modelu. Aby sme mohli kvantifikovať úspešnosť jednotlivých metód, zobrazili sme aj hodnotu optimálneho stavu nominálneho modelu a zariadenia.

Dvojkroková optimalizácia sa vo väčšine prípadov už v druhej iterácii dostala do blízkosti optima zariadenia, ale v ďalších iteráciách sa od neho výrazne vzdialila a môžeme vidieť, že vo väčšine prípadov nás dvojkroková optimalizácia nedokáže priviesť do optimálneho ustáleného stavu zariadenia. Dôvod je nasledovný. V prípade, že máme k dispozícii iba malé množstvo údajov, tak odhad parametrov je relatívne nepresný, čo vedie ku kombinácii parametrov nominálneho modelu, ktorého optimálny ustálený stav sa zhoduje so zariadením. Ale so zvyšujúcim sa počtom údajov nám rastie aj presnosť odhadu a interval možných hodnôt parametrov sa znižuje. Výsledkom potom môže byť nominálny model, ktorého účelová funkcia má taký priebeh, že spôsobuje problémy pri samotnej optimalizácii (najmä pri veľkých hodnotách K_I , rádovo 10^{10} a pod.). Najhoršie na tom je, že výsledné hodnoty rýchlosti riedenia získané optimalizáciou vedú náš systém do stavu vymytia.

Teoreticky, najlepšie by si s problematikou optimalizácie prevádzky zariadenia na základe nepresného mechanistického modelu mala poradiť schéma úpravy modifikátora, pretože ako jediná metóda nás dokáže dostať do skutočného optima zariadenia. Toto by sa týkalo situácie, keby výstupy zo systému neboli zaťažované chybou merania. V opačnom



(a) Optimálne hodnoty D vyjadrené ako hodnota účelovej funkcie Monod modelu (zariadenia).

(b) Záber z blízka.

Obr. 5.18: Porovnanie priemerných výsledkov optimalizácie prevádzky zariadenia jednotlivých prístupov pri rôznych realizáciách šumu merania s rozptylom $W_x = 0.03 \text{ g L}^{-1}$ a $W_s = 0.025 \text{ g L}^{-1}$. Označenie “PE” reprezentuje dvojkrovkovú optimalizáciu, “MAS” schéma úpravy modifikátora, “HYB” hybridné modelovanie.

pripade už nemáme zabezpečenú konvergenciu. Ako môžeme vidieť na Obr. 5.18b, tak po 20 iteráciách sme sa v priemere dostali do blízkeho okolia optimálneho režimu zariadenia. Jasnou nevýhodou tejto metódy je, že vo väčšine prípadov je konvergencia veľmi pomalá a to môže byť veľký problém, ak jedna iterácia trvá hodiny alebo dni ako v našom prípade. Ďalšou nevýhodou je, že potrebujeme údaje o ustálenom stave koncentrácie biomasy a tá sa bežne ani nemeria, a keď aj áno, tak s veľkým rozptylom chyby merania. Avšak, táto metóda má potenciál byť silným nástrojom pri riešení optimalizácie zariadenia, ale nastavenie tejto metódy tak, aby sme zabezpečili aspoň ako takú efektivitu, je veľmi náročné a pravdepodobne si vyžaduje množstvo ďalších úprav.

V prechádzajúcej časti sme uviedli, že iteračná metóda v spojení s hybridným modelovaním nie je najvhodnejším adeptom na hľadanie optimálneho ustáleného stavu zariadenia. A to z dôvodu, že nedokáže skonvergovať ku skutočnému optimu zariadenia, ale dostane sa iba do jeho blízkeho okolia. Na druhej strane, ak porovnáme jednotlivé priebehy optimalizačného procesu, viď Obr. 5.18b, je zrejmé, že táto metóda si vo väčšine prípadov vedie najlepšie, aj napriek spomenutému nedostatku. Najväčším rozdielom oproti schéme úpravy modifikátora je v rýchlosti konvergencie. Ak sa zhodneme na tom, že v priemere sa dostali do rovnakej vzdialenosti od optima, tak zatiaľ

čo schéme úpravy modifikátora to trvalo 20 iterácií, čo je v prípade biochemického reaktora 1000 hodín, hybridným modelom to trvalo 5 iterácií, teda 250 hodín. Ďalšou výhodou je, že pri hybridnom modelovaní, šum merania nezohráva tak významnú úlohu, akou je pri schéme úpravy modifikátora.

Mechanistické modelovanie môže byť veľmi komplikovaná záležitosť, najmä ak sa snažíme matematicky opísať komplexné zariadenia. Na druhej strane, výsledné modely sú transparentné a ľahko pochopiteľné, pretože majú za sebou skutočnú fyzikálnu podstatu. Tento prístup k modelovaniu má však viacero nevýhod akými sú časová aj finančná náročnosť a skutočnosť, že po čase nemusí matematický model zodpovedať reálnemu zariadeniu kvôli zmenám v prevádzke zariadenia.

Dátové modelovanie dokáže obísť všetky spomenuté problémy, plus dátové modely majú výrazne jednoduchšiu štruktúru a sú flexibilnejšie. Ale ich štruktúra nám nič neprezradí o samotnej povahe procesu. S dátovým modelovaním sa spájajú ešte ďalšie problémy ako voľba správnej štruktúry dátového modelu a odhad jeho parametrov. Väčšina konvenčných metód nerieši problematiku voľby vhodnej štruktúry modelu, pričom táto problematika je rovnako dôležitá a výrazne komplikovanejšia ako odhad parametrov modelu. Metóda garantovaného odhadu nám ponúka informácie o minimálnom ráde (štruktúre) modelu a v spojení s Pareto frontom sme dokázali posúdiť aj kvalitu modelov vyšších rádov. Vhodný rád modelu sme potom zvolili na základe kompromisu medzi presnosťou odhadu modelu a jeho maximálnym rozptylom odhadu. V ďalšej časti identifikácie pomocou GOP sme získali garantovanú oblasť všetkých možných riešení, v rámci stanovenej chyby modelu. Táto oblasť, ktorá je určená minimálnou a maximálnou realizáciou modelu nám zaručuje, že skutočné riešenie leží vo vnútri.

Hybridné modely predstavujú kombináciu mechanistických a dátových modelov, pričom využívajú výhody z oboch skupín — v porovnaní so samotným mechanistickým modelom vykazujú presnejšie predikčné vlastnosti a na rozdiel od samotného dátového modelu dosahujú lepšiu interpoláciu aj extrapoláciu a interpretácia a analýza dát sú výrazne ľahšie. Z týchto dôvodov si našli široké uplatnenie v oblasti automatizácie. Optimalizácia v reálnom čase zahŕňa metódy, ktoré sa dokážu vysporiadať s problematikou odlišnosti správania zariadenia a jeho mechanistického modelu. My sme spomenuli dvojkrokovú optimalizáciu, schému úpravy modifikátora a hybridné

modely. V tejto práci sme sa rozhodli demonštrovať funkčnosť jednotlivých metód pri optimalizácii prevádzky prietokového biochemického reaktora, pretože ponúkajú veľa problémov s modelovaním v dôsledku prítomnosti živých organizmov. Výsledky práce nás priviedli k záveru, že dvojkroková optimalizácia nie je vhodný nástroj na optimalizáciu prietokového biochemického reaktora, pretože vo väčšine prípadov uviedla zariadenie do stavu vymytia. Schéma úpravy modifikátora a hybridné modelovanie si viedli veľmi podobne. V priemere nás dostali do približne rovnakého okolia od optimálneho ustáleného stavu. Ale veľký rozdiel bol v rýchlosti konvergenzie. Zatiaľ čo metóde schémy úpravy modifikátora to v priemere trvalo celých 20 iterácií, čo v prípade nami zadaného biochemického reaktora predstavovalo 1000 hodín, hybridné modely to zvládli za 5 iterácií, teda 250 hodín. Výrazný rozdiel oboch metód bol aj v citlivosti na šum merania, kde hybridné modely jasne napredovali.

Touto diplomovou prácou sme ukázali, že dokážeme aplikovať metódu garantovaného odhadu parametrov pri hybridnom modelovaní, a že takýto prístup vieme následne použiť pri optimalizácii prevádzky zariadenia. Víziou budúcej práce by mohla byť aplikácia takto zhotovených hybridných modelov pri riadení dynamických systémov, kde by mohli nájsť väčšie uplatnenie.

Literatúra

- [1] Fabien B.C. Agrawal S.K. *Static Optimization*, chapter 1, pages 1–18. Springer, Dordrecht, 1999.
- [2] Petra Artzová and Radoslav Paulen. Moving-horizon guaranteed parameter estimation. *IFAC-PapersOnLine*, 52(1):112 – 117, 2019. 12th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems, including Biosystems DYCOPS 2019.
- [3] Mohammed Saad Faizan Bangi and Joseph Sang-Il Kwon. Deep hybrid modeling of chemical process: Application to hydraulic fracturing. *Computers & Chemical Engineering*, 134:106696, 2020.
- [4] J.V. Beck and K.J. Arnold. *Parameter Estimation in Engineering and Science*. Probability and Statistics Series. Wiley, 1977.
- [5] Naveen Bhutani, Gade Rangaiah, and Ajay Ray. First-principles, data-based, and hybrid modeling and optimization of an industrial hydrocracking unit. *Industrial & Engineering Chemistry Research - IND ENG CHEM RES*, 45, 10 2006.
- [6] George E. P. Box. Science and statistics. *Journal of the American Statistical Association*, 71(356):791–799, 1976.
- [7] Kenneth P. Burnham and David R. Anderson. Multimodel inference: Understanding aic and bic in model selection. *Sociological Methods & Research*, 33(2):261–304, 2004.
- [8] Joe deSpautz. Quantifying the benefits of automation. *ISA Transactions*, 33(2):107 – 112, 1994.
- [9] Paulo C. Emiliano, Mário J.F. Vivanco, and Fortunato S. [de Menezes]. Information criteria: How do they behave in different models? *Computational Statistics & Data Analysis*, 69:141 – 153, 2014.

- [10] J. Fikar, M. a Mikleš. *Identifikácia systémov*. Vydavateľstvo STU v Bratislave, 1. vydanie edition, 1999.
- [11] Franz Hamilton, Alun Lloyd, and Kevin Flores. Hybrid modeling and prediction of dynamical systems. *PLoS computational biology*, 13:e1005655, 07 2017.
- [12] Katalin Hangos and I. Cameron. *Process Modelling and Model Analysis*, volume 4, pages 4–10. Academic Press, 01 2001.
- [13] Reinaldo Hernández and Sebastian Engell. Economics optimizing control with model mismatch based on modifier adaptation. *IFAC-PapersOnLine*, 52(1):46 – 51, 2019. 12th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems, including Biosystems DYCOPS 2019.
- [14] GENE H. HOSTETTER. Chapter 13 - recursive estimation. In Douglas F. Elliott, editor, *Handbook of Digital Signal Processing*, pages 899 – 940. Academic Press, San Diego, 1987.
- [15] Xianghao Hou, Jianping Yuan, Chuan Ma, and Chong Sun. Parameter estimations of uncooperative space targets using novel mixed artificial neural network. *Neurocomputing*, 339:232 – 244, 2019.
- [16] Nirmala Kaushik. Bioreactors – technology & design analysis jagriti singh, nirmala kaushik* & soumitra biswas. *The Scitech Journal*, 1:28–36, 06 2014.
- [17] Junmo Koo, Damdae Park, Sangwon Ryu, Gon-Ho Kim, and Youn-Woo Lee. Design of a self-tuning adaptive model predictive controller using recursive model parameter estimation for real-time plasma variable control. *Computers & Chemical Engineering*, 123:126 – 142, 2019.
- [18] Changzhao Liu, Xiansong Yin, Yinghua Liao, Yuanyuan Yi, and Datong Qin. Hybrid dynamic modeling and analysis of the electric vehicle planetary gear system. *Mechanism and Machine Theory*, 150:103860, 2020.
- [19] Zhe Liu, Weili Liu, Michelle Adams, Raymond P. Cote, Yong Geng, and Shuilong Chen. A hybrid model of lca and emergy for co-benefits assessment associated with waste and by-product reutilization. *Journal of Cleaner Production*, 236:117670, 2019.
- [20] A. G. Marchetti, T. de Avila Ferreira, S. Costello, and D. Bonvin. Modifier adaptation as a feedback control scheme. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 59(6):2261–2274, 2020.

- [21] B.R. Martin. Chapter 8 - parameter estimation ii: Least-squares and other methods. In B.R. Martin, editor, *Statistics for Physical Science*, pages 143 – 172. Academic Press, Boston, 2012.
- [22] Siamak Mehrkanoon, Tillmann Falck, and Johan Suykens. Parameter estimation for time varying dynamical systems using least squares support vector machines. 07 2012.
- [23] Srikanta Mishra and Akhil Datta-Gupta. Chapter 8 - data-driven modeling. In Srikanta Mishra and Akhil Datta-Gupta, editors, *Applied Statistical Modeling and Data Analytics*, pages 195 – 224. Elsevier, 2018.
- [24] Fiorenzo Mornati. Pareto optimality in the work of pareto. *Revue européenne des sciences sociales*, 51-2(2):65–82, 2013.
- [25] Anwesh Reddy [Gottu Mukkula] and Radoslav Paulen. Model-based design of optimal experiments for nonlinear systems in the context of guaranteed parameter estimation. *Computers & Chemical Engineering*, 99:198 – 213, 2017.
- [26] Nicolai Panikov. *Kinetics of Microbial Processes*. In.: 12 2016.
- [27] Dimitris C. Psychogios and Lyle H. Ungar. A hybrid neural network-first principles approach to process modeling. *AIChE Journal*, 38(10):1499–1511, 1992.
- [28] Zheng Qian, Yan Pei, Hamidreza Zareipour, and Niya Chen. A review and discussion of decomposition-based hybrid models for wind energy forecasting applications. *Applied Energy*, 235:939 – 953, 2019.
- [29] Singiresu S. Rao. *Introduction to Optimization*, chapter 1, pages 1–62. John Wiley & Sons, Ltd, 2009.
- [30] Rosemary Rock-Evans. 2 - data modelling. In Rosemary Rock-Evans, editor, *Data Modelling and Process Modelling*, pages 19 – 52. Butterworth-Heinemann, 1992.
- [31] B. Srinivasan, S. Palanki, and D. Bonvin. Dynamic optimization of batch processes: I. characterization of the nominal solution. *Computers & Chemical Engineering*, 27(1):1 – 26, 2003.
- [32] Ashutosh Srivastava, Sandhya Premnath Tiwari, Osamu Miyashita, and Florence Tama. Integrative/hybrid modeling approaches for studying biomolecules. *Journal of Molecular Biology*, 2020.
- [33] Walter J.H. Stortelder. Parameter estimation in dynamic systems. *Mathematics and Computers in Simulation*, 42(2):135 – 142, 1996. Mathematical Modelling and Simulation in Agriculture and Bio-Industries Proceedings of the 1st IMACS-IFAC Symposium Msu2SABI.

- [34] Alejandro Villaverde, Fabian Froehlich, Daniel Weindl, Jan Hasenauer, and Julio Banga. Benchmarking optimization methods for parameter estimation in large kinetic models. *Bioinformatics*, 35, 08 2018.