УДК 62-5.001.57:519.2

ИНФОРМАЦИОННАЯ ОЦЕНКА ТОЧНОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

В. В. КАФАРОВ, Г. И. МАНКО, В. П. МЕШАЛКИН, В. И. ПИНСКИЙ

(Москва)

Вводится численная мера количества информации для детерминированных процессов. На ее основе разработана оценка точности моделирования.

Решение задач идентификации химико-технологических процессов (ХТП) имеет ряд особенностей. Процессы химической технологии представляют собой сложные комплексы физико-химических явлений и характеризуются многообразием параметров состояния, насыщенностью их взаимосвязей, большим числом разнообразных возмущений, что определяет огромную информационную насыщенность ХТП [1]. При этом следует отметить, что в ходе идентификации ХТП приходится иметь дело с относительно высоким уровнем информационного шума, что объясняется наличием неучтенных факторов, определяющих ход протекания ХТП, и необходимостью проведения большого числа измерений, неизбежно сопровождающихся ошибками.

Затруднения, возникающие при попытке охватить весь объем информации о ХТП, и наличие информационного шума вынуждают использовать модели, описывающие ХТП с той или иной степенью приближения. Поэтому одним из наиболее важных этапов идентификации ХТП является оценка точности получаемой модели.

Оценка точности моделирования ХТП производится, как правило, путем сравнения переменных величин, отображающих характер изменения состояния идентифицируемого ХТП (выходных переменных объекта) и определяемых по исследуемой модели (выходных переменных модели). Количественное определение степени отличий выходных переменных объекта от выходных переменных модели осуществляется с использованием различных методов, выбор которых зависит как от характера модели (детерминированная или стохастическая), так и от метода ее получения. Выделим три класса численных оценок отличий переменных объекта от переменных модели.

1. Оценки по методу наименьших квадратов. Эти оценки используют чаще всего для моделей, полученных детерминированными методами. Точность модели при использовании метода наименьших квадратов считается тем выше, чем меньше квадратичное отклонение измеренных значений переменных объекта от соответствующих им прогнозируемых значений переменных модели [2].

Выбор критического значения оценки точности модели по методу наименьших квадратов затруднителен и связан, как правило, с целевым назначением модели, поэтому однозначно не решается. Это усложняет, а часто и делает невозможным сравнение точности различных моделей с использованием этого критерия.

2. Дисперсионные оценки, основой которых является дисперсия выходной переменной модели. К этому классу оценок можно отнести как традиционные критерии адекватности регрессионных моделей — критерий Фишера [1, 3] и γ-критерий [4], так и меру определенности [5].

Использование дисперсионных оценок строго справедливо лишь для случая нормального распределения вероятностей значений выходных переменных ХТП. На практике закон распределения выходной переменной может существенно отличаться от нормального. В этом случае возникает значительная погрешность при расчете меры точности модели. Кроме того, критерий Фишера и γ-критерий не могут быть использованы для сравнительной оценки точности моделей, существенно отличающихся друг от друга ХТП. Расчет же меры определенности связан с большим объемом вычислений и, как отмечено в [5], требует знания числовых характеристик входных и выходных случайных функций и внутреннего состояния исследуемого объекта, а также взаимосвязей между ними.

3. Информационные оценки основаны на расчете количества информации об исследуемом объекте. К этому классу относится информационная мера определенности (ИМО).

ИМО является более общей характеристикой степени изоморфности модели реальному объекту, чем упомянутая выше мера определенности, так как ИМО определяется по общим характеристикам переменных объекта (совместным и условным плотностям вероятности), в то время как мера определенности находится только по числовым характеристикам этих переменных ([6], стр. 127).

Однако использование ИМО для оценки точности моделирования ХТП является еще более трудоемким, а в ряде случаев и практически невозможным. Как и рассмотренные ранее оценки, ИМО не позволяет сравнивать по точности модели различных ХТП. Существенные трудности возникают и при попытке использования ИМО для оцеп ки точности моделей, полученных детерминированными методами.

Цель настоящей работы — введение универсальной информационной оценки точности моделирования, применимой при любом методе идентификации и позволяющей сравнивать точность моделей, существенно отличающихся друг от друга методом получения (аналитическим или экспериментальным), характером (детерминированные или стохастические модели), конкретной реализацией (физические или математические модели) и другими признаками. Такая оценка может быть получена с помощью понятия полезной информации [7].

Согласно [7], сообщение, изменяющее для наблюдателя неопределенность N_1 на неопределенность N_2, несет полезную информацию

(1) $I_n = N_1 - N_2$.,

Если реальной выходной переменной ХТП y соответствует выходная переменная модели y, а реальному распределению вероятностей $P = \{p(y_i)\}$ значений величины y соответствует гипотетическое распределение $Q = \{q(y_i)\}$, задаваемое моделью, то рассматриваемая модель несет исследователю дезинформацию в количестве

(2) $$D = N(y/\hat{y}) - H(y),$$

где $$N(y/\hat{y}) = -\sum_i p(y_i) \log q(y_i); \qquad H(y) = -\sum_i p(y_i) \log p(y_i).$$

С целью разработки критерия оценки точности моделей, полученных как статистическими, так и детерминированными методами, необходимо ввести количественную меру информации, содержащуюся в детерминированном процессе. Обычно в качестве информационной характеристики детерминированного процесса используется разнообразие множества состояний процесса, измеряемое логарифмом числа элементов этого множества [8]. Однако, как видно из рис. 1, разнообразия состояний процессов 1 и 2 на интервале наблюдения T равны друг другу, в то время как процесс 2 является информативно более сложным, чем процесс 1, характеризующийся постоянством скорости изменения. Предложенная в работе [9] количественная мера разнообразия рассчитывается относительно размеров области существования детерминированного процесса, что затрудняет использование такой меры для сравнения тех или иных характеристик существенно отличающихся друг от друга объектов. С этой точки зрения удобнее было бы соотносить меру информации с некоторой величиной, которую можно условиться считать общепринятой.

Рис. 1. Сравнение информационной насыщенности детерминированных процессов 1 и 2. T-интервал наблюдения

Известно, что количество информации, содержащейся в непрерывном процессе, бесконечно велико [10]. Однако измерение значений переменных ХТП всегда сопровождается погрешностями. Результаты измерений, различающиеся между собой на величину, меньшую, чем погрешность измерения, можно считать соответствующими одному и тому же значению измеряемой переменной. Таким образом, в ходе исследования ХТП его выходная непрерывная переменная может рассматриваться как дискретная с шагом квантования, зависящим от погрешности измерения. В [11] введено понятие порога различимости ε_y как наибольшего значения модуля разности двух значений переменной y, которые невозможно различить из-за погрешностей измерения или не имеет смысла различать с той или иной точки зрения.

Исходя из этого, расчет количества информации в детерминированной переменной $y(t)$ будем вести относительно значения порога различимости ε_y. Очевидно, что информационная насыщенность переменной $y(t)$ зависит от интенсивности ее изменения, которую будем характеризовать величиной

(3) $$\pi_y(t) = \frac{|dy/dt|}{\varepsilon_y}.$$

На отрезке времени $[t_1,\ t_2]$ число значений переменной $y(t)$, отстоящих друг от друга на величину ε_y, определяется следующим образом:

$$M(t_1, t_2) = \int_{t_1}^{t_2} \pi_y(t)\,dt + 1. \quad (4)$$

Поэтому разнообразие значений y(t) на отрезке $[t_1, t_2]$ равно

$$R(t_1, t_2) = \log\left[\int_{t_1}^{t_2} \pi_y(t)\,dt + 1\right]. \quad (5)$$

На основе элементарных соотношений математического анализа можно записать

$$\varepsilon_y = |dy/dt|_{t=t^*}\Delta t_\varepsilon, \quad (6)$$

где Δt_ε — интервал времени, в течение которого y (t) изменяется на величину порога различимости; t^* — некоторое значение t из промежутка $t \le t^* \le t + \Delta t_\varepsilon$. Если $y(t)$ мало изменяется за время Δt_ε, можно принять

$$\varepsilon_y = |dy(t^*)/dt|\Delta t_\varepsilon, \qquad \pi_y(t) = 1/\Delta t_\varepsilon. \quad (7)$$

Тогда разнообразие y(t) на отрезке $[t, t+\Delta t_\varepsilon]$ в случае двоичного логарифма равно

$$R_\varepsilon = \log\left[\int_t^{t+\Delta t} \pi_y(t)\,dt + 1\right] = \log[\pi_y(t)\Delta t_\varepsilon + 1] = \log 2 = 1 \text{ бит}. \quad (8)$$

За время t, прошедшее с момента начала отсчета, разнообразие $y(t)$ достигает величины

$$R_y(t) = \log\left[\int_0^t \pi_y(t)\,dt + 1\right]. \quad (9)$$

При этом скорость создания разнообразия

$$V_y(t) = \frac{dR_y(t)}{dt} = \frac{\pi_y(t)}{1 + \int_0^t \pi_y(t)\,dt}\log e. \quad (10)$$

Аналогично используемому в теории информации понятию энтропии введем интегральную характеристику изменчивости (ИХИ) переменной y(t) в виде следующего функционала:

$$\Upsilon_y = \frac{\int_T \pi_y(\theta)\log[\pi_y(\theta)\,\varepsilon_t]\,d\theta}{\int_T \pi_y(\theta)\,d\theta} \quad (11)$$

где ε_t – порог различимости времени; θ – относительное время ($\theta = t/T$, T — интервал наблюдения).

ИХИ отвечает интуитивно предполагаемым требованиям, предъявляемым к мере количества информации. Она обладает свойством аддитивности, не зависит от конкретных значений переменной $y(t)$, минимальна при $dy/dt = \text{const}$.

Для доказательства последнего свойства ИХИ используем соотношение, справедливость которого показана в [12] (стр. 173):

$$\log_a u = \frac{\ln u}{\ln a} \geqslant \frac{1}{\ln a}\left(1 - \frac{1}{u}\right). \quad (12)$$

Из (12) следует, что для любых $p(\theta) \ge 0$ и $q(\theta) \ge 0$, удовлетворяющих условию $\int_T p(\theta)\,d\theta = \int_T q(\theta)\,d\theta$, имеют место следующие соотношения:

$$\int_T p(\theta)\log\frac{p(\theta)}{q(\theta)} \geqslant \frac{1}{\ln a}\int_T p(\theta)\left(1-\frac{q(\theta)}{p(\theta)}\right)d\theta=0,$$

(13) $$\int_T p(\theta)\log p(\theta)\,d\theta \geqslant \int_T p(\theta)\log q(\theta)\,d\theta.$$

Пусть $p(\theta)=\dfrac{\pi(\theta)}{\int_T \pi(\theta)\,d\theta}$, $q(\theta)=\dfrac{\rho(\theta)}{\int_T \pi(\theta)\,d\theta}$, $\rho(\theta)=\dfrac{C}{\varepsilon_y}$, $C=\text{const}$. В этом случае неравенство (13) принимает следующий вид:

(14) $$\frac{\int_T \pi(\theta)\log\pi(\theta)\,d\theta}{\int_T \pi(\theta)\,d\theta} \geqslant \frac{\int_T \pi(\theta)\log\rho(\theta)\,d\theta}{\int_T \pi(\theta)\,d\theta}$$

или

(15) $$\Upsilon_y \geqslant \log\frac{C}{\varepsilon_y}.$$

Знак равенства в (15) имеет место только при $\pi(\theta)=C/\varepsilon_y$, т. е. при $|dy/dt|=C$, Таким образом, для любой переменной $y(t)$ ИХИ минимальна в случае постоянства скорости изменения переменной.

Обозначим интенсивность изменения выходной переменной модели ХТП через $\hat{\pi}_y(t)$. По аналогии с неопределенностью Бонгарда введем условную ИХИ переменной $y(t)$ относительно переменной $\hat{y}(t)$

(16) $$\hat{\Upsilon}_y=\frac{\int_T \pi_y(\theta)\log[\hat{\pi}_y(\theta)\,\varepsilon_t]\,d\theta}{\int_T \pi_y(\theta)\,d\theta}.$$

Разность $D=\Upsilon_y-\hat{\Upsilon}_y$ определяет количество дезинформации, вносимой рассматриваемой моделью, и служит мерой точности модели:

(17) $$D=\frac{\int_T \pi_y(\theta)\log\dfrac{\pi_y(\theta)}{\hat{\pi}_y(\theta)}\,d\theta}{\int_T \pi_y(\theta)\,d\theta}.$$

С целью сравнения оценок точности, рассчитанных при разных порогах различимости, введем относительную оценку точности моделей. Для этого будем считать, что исследуемая модель содержит некоторый запас информации об объекте. За нулевой уровень То примем запас информации в модели, согласно которой интенсивность изменения переменной $y(t)$ постоянна на интервале наблюдения T, т. е. $\hat{\pi}(\theta)=\pi_0=\text{const}$,

(18) $$\Upsilon_0=\frac{\int_T \pi_y(\theta)\log\pi_0\,d\theta}{\int_T \pi_y(\theta)\,d\theta}=\log\pi_0.$$

Запас информации в исследуемой модели оцениваемся выражением

(19) $$I=\hat{\Upsilon}_y-\log\pi_0.$$

Максимально возможный запас информации содержит абсолютно точная модель ХТП

20) $$I_{\text{макс}}=\Upsilon_y-\log\pi_0.$$

Отношение запаса информации в исследуемой модели к максимально возможному запасу дает относительную оценку точности модели

21) $$\eta=\frac{\hat{\Upsilon}_y-\log\pi_0}{\Upsilon_y-\log\pi_0}.$$

Для многомерного ХТП общая оценка точности может быть получена следующим образом:

22) $$\eta=\sum_{i=1}^{n}C_i\eta_i,\qquad 0\leqslant C_i\leqslant 1,$$

где η_i — оценка точности моделирования i-й выходной переменной в описании состояния ХТП. При затруднении в оценке долевого участия переменных в описании ХТП коэффициенты C_i принимаются равными друг другу.

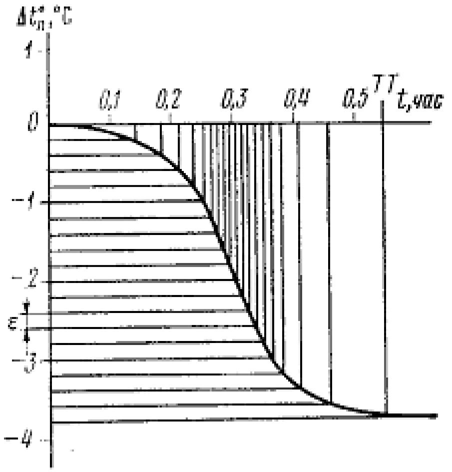

Рис. 2. Обработка графика кривой разгона колонны синтеза карбамида. Δt°_{n} — изменение температуры предверха колонны; ε — порог различимости: *TT* — верхняя граница интервала наблюдения

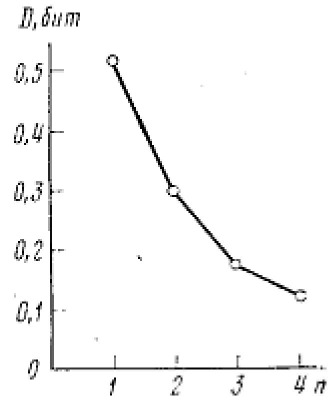

Рис. 3. Зависимость меры дезинформации D от порядка передаточной функции колонны синтеза карбамида, n — порядок передаточной функции

Рассмотрим одно из возможных применений меры дезинформации D на примере оценки точности передаточной функции колонны синтеза карбамида Новомосковского химкомбината по каналу «расход раствора углеаммонийных солей — температура предверха колонны». По кривой разгона колонны [13] были рассчитаны передаточные функции первого, второго, третьего и четвертого порядков, по которым в свою очередь были построены графики переходного процесса при входном воздействии, соответствующем исходной кривой разгона.

Измерения температуры предверха колонны производились с точностью до 0,2 °С, что и определило выбор порога различимости равным 0,2 °С. Интервал наблюдения T был принят равным времени, по истечении которого отклонение кривой разгона от установившегося значения не превышает 1%.

Расчет величины D для каждой из передаточных функций производился на ЭВМ. В программе расчета использовался дискретный вид выражения (17)

(23) $$D=\frac{\sum_j \pi_j\log_2\frac{\pi_j}{\hat{\pi}_j}}{\sum_j \pi_j};$$

(24) $$\pi_j = \frac{1}{\theta_{j+1} - \theta_j}, \qquad \theta_j = \frac{t_j}{T};$$

(25) $$\hat{\pi}_j = \frac{1}{\hat{\theta}_{j+1} - \hat{\theta}_j}, \qquad \hat{\theta}_j = \frac{\hat{t}_j}{T}.$$

Моменты времени t_j, $\hat{t}_j$ в (24) и (25) определялись следующим образом. Параллельно оси абсцисс проводятся прямые, отстоящие друг от друга на величину порога различимости (см. рис. 2). Определяются моменты t_j пересечения кривой разгона с этими прямыми. Аналогичным образом обрабатываются графики переходных процессов для каждой из передаточных функций. Тем самым для каждой передаточной функции определяются используемые в программе расчета моменты времени $\hat{t}_j$.

Зависимость меры дезинформации от порядка передаточной функции приведена на рис. 3. Из рисунка видно, что скорость уменьшения величины D существенно замедляется для передаточных функций выше третьего порядка. Это позволяет сделать вывод о целесообразности использования для построения модели колонны передаточной функции третьего порядка, так как дальнейшее увеличение порядка не дает существенного увеличения точности модели, а уменьшение порядка ниже третьего приводит к заметному увеличению вносимой моделью дезинформации.

Поступила в редакцию 16 февраля 1979 г.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. *Кафаров В. В.* Методы кибернетики в химии и химической технологии. «Химия», 1976.

2. Построение математических моделей химико-технологических объектов. «Химия», 1970.

3. *Рузинов Л. П.* Статистические методы оптимизации химических процессов. «Химия», 1972.

4. *Бородюк В.* ***П.,*** *Лецкий* ***Э.*** *К.* Статистическое описание промышленных объектов. «Энергия», 1971.

5. *Райбман Н. С, Чадеев В. М.* Адаптивные модели в системах управления. «Сов. радио», 1966.

6. *Райбман Н. С, Шпунт М. И., Овсепян Ц. Б., Дургарян И. С.* Информационная мера определенности и ее использование при идентификации объектов управления. В кн. «Идентификация и аппаратура для статистических исследований», стр. 126-137, «Наука», 1970.

7. *Вонгард М. М.* Проблема узнавания. «Наука», 1967.

8. *Эшби У. Р.* Введение в кибернетику. Изд-во иностр. лит., 1959.

9. *Кочубиевский И. Д., Король Е. В., Попова Е. К.* Введение меры разнообразия процессов управления. В сб. «Информационные методы в системах управления, измерения и контроля», стр. 59—71. Изд-во Дальневосточного центр, бюро техн. информ., Владивосток, 1968.

?10. *Солодов А. В.* Теория информации р ее применение к задачам автоматического управления и контроля. «Наука», 1967.

11. *Петров Б. П., Ночубиевский И. Д., Уланов Г. М.* Информационные аспекты управления технологическими процессами. Техническая кибернетика, № 4, стр. 3—5, 1967.

12. *Пугачев В. С.* Теория случайных функций и ее применение к задачам автоматического контроля. Физматгиз, 1960.

13. *Пинский В. И.* Автоматизированный анализ динамических характеристик и чувствительности сложных химико-технологических систем на примере отделений синтеза и дисцилляции в производстве карбамида. Канд. дисс. Московский химико-технологический институт, 1975.

INFORMATION-WISE ESTIMATE OF CHEMICAL PROCESS MODELING ACCURACY

V. V. KAFAROV, G. I. MAHKO, V. P. MESHALKIN, V. I. PINSKIY

A quantitiative measure of the amount of information is introduced for deterministic processes and used in estimating the modeling accuracy.