

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
“ХАРКІВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ”**

Демидов Всеволод Ігорович

УДК 519.651:544.016

**СИСТЕМА ПІДТРИМКИ ПРИЙНЯТТЯ РІШЕНЬ  
В АВТОМАТИЗОВАНІЙ СИСТЕМІ УПРАВЛІННЯ  
ТЕХНОЛОГІЧНИМ ПРОЦЕСОМ СИНТЕЗУ ЖИРІВ  
ІЗ ПОТРІБНИМИ ВЛАСТИВОСТЯМИ**

Спеціальність 05.13.07 – автоматизація технологічних процесів

Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата технічних наук

Харків – 2007

Дисертацією є рукопис

Робота виконана в Національному технічному університеті “Харківський політехнічний інститут” Міністерства освіти і науки України, м. Харків

Науковий керівник: доктор технічних наук, професор  
Раскін Лев Григорович,  
Національний технічний університет “Харківський політехнічний інститут”, професор кафедри економічної кібернетики і маркетингового менеджменту

Офіційні опоненти: доктор технічних наук, професор  
Тошинський Володимир Ілліч,  
Національний технічний університет “Харківський політехнічний інститут”, професор кафедри автоматизації хіміко-технологічних систем та екологічного моніторингу

кандидат технічних наук,  
Заболотний Олександр Віталійович,  
Національний аерокосмічний університет ім. М.Є. Жуковського “ХАІ”, м. Харків, доцент кафедри авіаційних приладів та вимірювань

Захист відбудеться 04.10.2007р. о 13 на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 64.050.07 у Національному технічному університеті “Харківський політехнічний інститут” за адресою: 61002, м. Харків, вул. Фрунзе, 21.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Національного технічного університету “Харківський політехнічний інститут” за адресою: 61002, м. Харків, вул. Фрунзе, 21.

Автореферат розісланий 03.09.2007р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради

Гамаюн І.П.

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** В процесі побудови автоматичних систем управління чи систем підтримки прийняття рішень розробники в більшості випадків зіштовхуються із проблемами слабой структурованості вихідних даних, а також з великою кількістю факторів, що впливають на систему. При цьому часто інформація про вплив того чи іншого фактору на процеси, які відбуваються в системі або зовсім відсутня, або наявні лише загальні припущення, що не завжди відповідають дійсності. Крім того, якщо питання про вплив на систему кожного із факторів окремо може бути вивчене навіть за умов незначної кількості експериментів (або спостережень, якщо експерименти неможливі), то вивчення питання взаємного впливу двох чи більшої кількості факторів в більшості випадків суттєво ускладнене. Практично у кожному сучасному виробничому процесі можна виділити достатньо велику кількість незалежних факторів, які впливають на сам процес. В залежності від складності вибраного процесу кількість таких факторів може досягати кількох сотень.

З підвищенням кількості факторів та враховуючи їх можливі взаємодії в будь-яких алгоритмах апроксимації чи прогнозування кількості незалежних коефіцієнтів, що їх треба налагодити, зростає лавиноподібно. Враховуючи, що для визначення кожного такого коефіцієнту з розумною точністю на один коефіцієнт повинно приходиться кілька замірів параметру, який досліджують, системи в різних точках простору факторів, то кількість необхідних вимірів зростає ще швидше і в більшості випадків об'єм рекомендованої вибірки складає тисячі, а, можливо, і сотні тисяч експериментів. Зрозуміло, що для більшості систем, що досліджуються, такі об'єми вибірки недосяжні через нестачу часу, фінансів та інших ресурсів. Тому для побудови моделей реальних процесів величезне значення набувають методи, які дозволяють зменшити необхідний об'єм вибірки до кількох десятків точок.

Виходячи з цього, розвиток методів прогнозування, які використовують невелику вибірку для побудови математичної моделі складних процесів, мають величезну важливість для побудови оптимального управління в задачах багатьох галузей. В роботі запропонована система підтримки прийняття рішень для автоматизованого управління технологічним процесом синтезу жирів, яка дозволяє суттєво знизити вимоги до об'єму вибірки. Розроблена система призначена для комплексного вирішення ряду важливих для харчової промисловості України задач. У зв'язку з цим тема дисертаційної роботи актуальна.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота виконувалась на базі держбюджетної роботи МОН України "Створення наукових основ нової енергозберігаючої технології одержання аналогів масла какао з використанням вітчизняної сировини" (ДР 0100U001089) та у рамках договору "Розроблення технології очистки рослинних олій та модифікації жирів за допомогою ферментативних препаратів" (план НДР Міністерства аграрної політики України, Український науково-дослідний інститут олій та жирів,

Національний технічний університет “ХПІ”), де здобувач був виконавцем окремих етапів.

**Мета і задачі дослідження.** Метою дисертаційної роботи є побудова системи підтримки прийняття рішень, яка дозволяє за незначного об’єму інформації про склад і властивості композиційних сумішей вирішувати задачі аналізу (по заданому складу речовини знайти його властивості) і задачі синтезу (для заданого набору інгредієнтів скласти рецептуру суміші із потрібними властивостями).

У зв’язку з цим було поставлено і вирішено наступні задачі:

- аналіз існуючих методів побудови функціоналу “склад-властивість” з метою вибору методів, найбільш прийнятних для вирішення задач в умовах малої вибірки;
- удосконалення вибраних методів з метою підвищення їх точності в умовах екстремально-малої вибірки;
- застосування удосконалених методів для вирішення задач в умовах малої вибірки на прикладі оцінки властивостей триацилгліцеринів та жирів по їх складу;
- розробка математичної моделі системи підтримки прийняття рішень в задачі синтезу жирів із потрібними властивостями.

*Об’єктом дослідження* є процес композиції складних переетерифікованих жирів, що задовольняють встановленим вимогам, із відомого набору компонентів.

*Предметом дослідження* є система підтримки прийняття рішень, що забезпечує можливість автоматизованого вирішення задач аналізу і синтезу композиційних сумішей.

*Методи дослідження.* В роботі для вирішення задач визначення властивостей жирів та триацилгліцеринів по їх складу застосовано методи функціонального та кластерного аналізу, регресійного аналізу, а також моделювання нейронних мереж. При вирішенні задачі побудови рецептур жирів застосовано метод Нелдера-Міда для пошуку екстремуму функції багатьох змінних. Для побудови системи підтримки прийняття рішень застосовано методи композиції та побудови ієрархії критеріїв.

**Наукова новизна одержаних результатів:**

- вперше запропоновано методику композиції апроксимаційного та нейромережевого підходів до вирішення задач оцінювання та прогнозування, що дозволяє підвищити точність оцінювання в задачах побудови моделі “склад-властивість” відносно до результатів кожного з цих методів;
- отримала подальший розвиток математична модель класу “склад-властивість” у вигляді апроксимуючих поліномів, яка за рахунок композиції аргументів дозволяє суттєво зменшити необхідний об’єм навчальної вибірки за умов збереження потрібної точності моделі;
- удосконалено спосіб ініціалізації матриці вагових коефіцієнтів для штучних нейронних мереж шляхом ортогоналізації векторів входу

нейронів скритого шару, що дозволило зменшити потрібний об'єм навчальної вибірки для досягнення заданої точності та підвищити швидкість навчання порівняно із традиційними методами;

- удосконалено методику розбиття вибірки на навчальну, тестову і контрольну шляхом максимізації репрезентативності кожної з них, який дозволяє підвищити якість прогнозування в умовах малої вибірки для будь-яких методів, в яких застосовуються наведені вибірки;
- вперше запропоновано методику оцінки температури плавлення триацилгліцеринів по жирнокислотному складу на базі удосконалених для умов малої вибірки методів побудови функціоналу “склад-властивість”;
- отримала подальший розвиток методика оцінки температури плавлення жирів по їх складу, що дозволяє суттєво підвищити точність прогнозування;
- вперше розроблено математичну модель системи підтримки прийняття рішень для вирішення задачі синтезу жирів із потрібними властивостями.

**Практичне значення одержаних результатів.** Удосконалено методи побудови функціоналу “склад-властивість” в умовах малої вибірки, що дозволяють суттєво підвищити точність оцінювання за умов незначної кількості інформації про об'єкт дослідження. Отримані наукові результати дозволили вирішити ряд важливих для харчової промисловості України задач, у тому числі: оцінювання температури плавлення триацилгліцеринів по жирнокислотному складу, оцінювання температури плавлення жирів із визначеним триацилгліцериновим чи жирнокислотним складом, отримання жирів із потрібною температурою плавлення із заданого набору інгредієнтів.

Результати роботи пройшли апробацію та використовуються Українським НДІ масел та жирів, м. Харків.

**Особистий внесок здобувача.** Всі основні наукові положення, результати, висновки і рекомендації дисертаційної роботи отримані здобувачем самостійно. Серед них: алгоритм визначення температури правління жирів і триацилгліцеринів по їх складу, методика розподілу вибірки на навчальну, тестову та контрольну, алгоритм розробленого нового методу для вирішення задачі побудови залежності класу “склад-властивість”, побудованого на використанні відсічених регресійних поліномів, модель взаємодії нейромережевого та апроксимаційного методів вирішення задачі прогнозування, алгоритм ініціалізації вагових коефіцієнтів зв'язку багат шарової штучної нейронної мережі, методика розрахунку концентрацій інгредієнтів для отримання жирів з потрібною температурою плавлення.

**Апробація результатів дисертації.** Про результати, що їх було отримано у дисертаційній роботі, доповідалося на наступних конференціях: XI науково-практична конференція “Інформаційні технології: наука, техніка, освіта, здоров'я” (м. Харків, 2003), “Системи автоматизації та автоматичне керування” (Севастополь, 2003), “Сучасні інформаційні технології в економіці та управлінні підприємствами, програмами та проектами” (Алушта, 2004), “XXI наукова конференція молодих вчених, аспірантів і студентів” (Київ, 2005).

**Публікації.** За результатами дисертаційної роботи опубліковано 9 наукових праць, серед них 7 – у фахових виданнях ВАК України.

**Структура та обсяг дисертації.** Дисертація складається зі вступу, 4-х розділів, висновків, списку використаних джерел, додатків. Повний обсяг дисертації складає 177 сторінок. Дисертаційна робота містить 27 рисунків за текстом, всі в основній частині, 8 таблиць за текстом, 2 таблиці на 2 сторінках, 4 додатки на 6 сторінках, список використаних джерел із 119 найменувань на 10 сторінках.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми, зазначено зв'язок роботи з науковими програмами, темами, сформульовано мету та задачі досліджень. Визначено об'єкт та предмет дослідження, зазначено основні наукові та практичні результати, наведено відомості про апробації результатів роботи та публікації.

В **першому розділі** наведено огляд теперішнього стану проблеми прогнозування в системі “склад-властивість” за умов екстремально малої вибірки. Розглянуто наступні моделі, що застосовуються в подібних задачах: апроксимаційний поліном, сплайн-апроксимація, моделювання із застосуванням штучних нейронних мереж (ШНМ), експертні системи.

Наведено сучасні методи побудови апроксимаційного поліному, які розроблено для пошуку виду функціональної залежності в системі “склад-властивість” за умов малої вибірки. Базою для розглянутих методів є метод групового урахування аргументів і метод структурної мінімізації ризику. Проведено порівняльний аналіз запропонованих методик, відображені переваги та недоліки кожного із розглянутих методів у випадку, коли існуюча вибірка екстремально мала, а апіорна інформація про систему не дозволяє зробити висновок про вид функції залежності.

На прикладі проблем, що стоять перед масложировою промисловістю України сформульовано кілька важливих задач, пов'язаних з прогнозуванням в системі “склад-властивість”. Зокрема:

- оцінка температури плавлення триацилгліцеринів і жирів із заданими властивостями;
- пошук рецептури жиру із бажаною температурою плавлення з використанням заданого набору інгредієнтів;
- вибір серед множини можливих рецептур такої, яка б найкращим чином відповідала додатковим критеріям (вартість, простота обробки, тощо).

**Другий розділ** роботи присвячено адаптації існуючих методів розв'язання подібних задач до конкретною задачі, що її необхідно вирішити. Детально розглянуто проблеми, які не дозволяють успішно застосовувати відомі методи, які розглянуто у першому розділі, для вирішення поставленої задачі. Виявлено такі найбільш поширені недоліки.

- Для методів, не адаптованих до умов малої вибірки – велика кількість вагових коефіцієнтів, які треба визначити для застосування методу.

- Для методів, адаптованих до умов малої (але не екстремально малої) вибірки – велика кількість ітерацій під час знаходження оптимального виду функціоналу, що потребує значну кількість даних використовувати не для навчальної, а для тестової вибірки.

Розроблено теоретичні основи методів відновлення виду функціональної залежності, які дозволяють знизити вимоги до об'єму навчальної вибірки.

Одним із засобів підвищення точності прогнозування за умов малої вибірки є використання відсічених апроксимаційних поліномів замість класичних – повних. Пошук полінома, який дозволяє досягти високої точності прогнозування при малій кількості незалежних коефіцієнтів проводився у наступному класі поліномів

$$L(x_1, x_2, \dots, x_m) = f_0(b_0, b_{11}, \dots, b_{1m}) + f_1(b_0, b_{11}, \dots, b_{1m})x_1 + f_m(b_0, b_{11}, \dots, b_{1m})x_m + \dots + f_{11}(b_{21}, \dots, b_{2m})x_1^2 + f_{12}(b_{21}, \dots, b_{2m})x_1x_2 + \dots + f_{mm}(b_{21}, \dots, b_{2m})x_m^2 + \dots,$$

де:  $b_{ik}$  - матриця коефіцієнтів,  $f_{ij}$  - будь-яка безперервна функція,  $m$  – розмірність факторного простору задачі.

Показано, що найбільша точність прогнозування досягається у випадку

$$f_0 = b_0, f_{i_1 i_2 \dots i_k} = \sum_{j=1}^k b_{k i_j}, i_1, i_2, \dots, i_k = 1, 2, \dots, m.$$

У цьому разі поліном приймає наступний вигляд

$$L_{d\Sigma} = b_0 + \sum_{i_1=1}^m b_{1i_1} x_{i_1} + \sum_{i_1=1}^m \sum_{i_2=1}^m (b_{2i_1} + b_{2i_2}) x_{i_1} x_{i_2} + \sum_{i_1=1}^m \dots \sum_{i_d=1}^m (b_{di_1} + \dots + b_{di_d}) x_{i_1} \dots x_{i_d}.$$

Зі збільшенням розмірності задачі кількість незалежних коефіцієнтів такого поліному збільшується лінійно на відміну від експоненційного росту в разі застосування класичних „повних” поліномів. Кількість коефіцієнтів в такому поліномі складає  $K_{d1} = dm + 1$ , де  $d$  – порядок поліному. Навіть для квадратичного полиному число коефіцієнтів значно зменшується: з  $\frac{(m+1)(m+2)}{2}$  до  $2m+1$ , що дозволяє використовувати меншу вибірку для вирішення задачі виявлення виду функціональної залежності. В роботі також показано, яким чином відшукати найкращий набір коефіцієнтів полиному  $B$ , використовуючи критерій найменшого середньоквадратичного відхилення на тестовій виборці.

Нехай для відшукування виду функціоналу зв'язку використовується  $N$  значень функції у різних точках. Тоді позначимо:  $x_{i,j}$  – значення фактора  $x_j$  в  $i$ -ій точці,  $Y = \begin{pmatrix} y_1 & y_2 & \dots & y_N \end{pmatrix}^T$  - вектор значень функції в позначених точках.

Позначимо також допоміжні матриці:

$$X = \begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \dots & x_{1,m} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & \dots & x_{2,m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{N,1} & x_{N,2} & \dots & x_{N,m} \end{pmatrix}, \quad H_{\Sigma 1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix},$$

$$H_{\Sigma 2} = 2 \begin{pmatrix} \sum_{i_1=1}^m x_{1,i_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sum_{i_1=1}^m x_{2,i_1} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \sum_{i_1=1}^m x_{N,i_1} \end{pmatrix}, \dots,$$

$$H_{\Sigma d} = d \begin{pmatrix} \sum_{i_2=1}^m \dots \sum_{i_d=1}^m x_{1,i_2} \dots x_{1,i_d} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \sum_{i_1=1}^m \dots \sum_{i_{d-1}=1}^m x_{1,i_1} \dots x_{1,i_{d-1}} \end{pmatrix}$$

і вектор  $B_d = (b_0, b_{11}, \dots, b_{1m}, b_{21}, \dots, b_{2m}, \dots, b_{d1}, \dots, b_{dm})^T$ .

Тоді вектор  $B_{d\Sigma}$ , що розшукується, може бути розрахований за формулою

$$B_{d\Sigma} = (H_{\Sigma}^T H_{\Sigma})^{-1} H_{\Sigma}^T Y,$$

де  $H_{\Sigma}$  – блочна матриця, складена наступним чином

$$H_{\Sigma} = \mathbf{E}_N \begin{bmatrix} \vdots & H_{\Sigma 1} X & H_{\Sigma 2} X & \vdots & \dots & \vdots & H_{\Sigma d} X \end{bmatrix}.$$

Також в цьому розділі роботи приведено нетрадиційний метод кластерного аналізу, який дозволяє зменшити розмірність задачі. На відміну від більшості методів кластерного аналізу, що вирішують задачу розділення великої кількості об'єктів на кілька компактних підгруп в просторі параметрів, цей метод дозволяє вирішити задачу групування параметрів. Для вирішення задачі кластеризації використовується матриця відстаней між параметрами. Було визначено, що найбільша ефективність досягається при застосуванні наступної методики, яка полягає у тому, що при визначенні статистичної залежності між концентраціями для деякого набору кислот, ці кислоти можна об'єднати в одну групу (кластер). Хімічні і фізичні властивості цієї суміші можна оцінити шляхом змішування кислот, які до неї входять, у пропорції, яка зустрічається найбільш часто. Ця пропорція повинна бути постійною для більшості жирів внаслідок високого ступеню лінійної залежності між концентраціями жирів, які увійшли до групи. В роботі було запропоновано два алгоритми, що реалізують наведену ідею. Нижче наведено опис алгоритму, який було застосовано для вирішення основних задач



дисертаційної роботи (в роботі також запропоновано алгоритм, який доцільно використовувати за умов більшої розмірності факторного простору, коли обчислювальності потужності комп'ютера для використання першого методу недостатньо).

Задля опису цих методів введемо наступний індикатор:

$$x_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{якщо параметр } j \text{ входить до } i - \text{тої групи,} \\ 0, & \text{якщо не входить.} \end{cases}$$

Тоді задача може бути сформульована наступним чином. Знайти набір  $x_{ij}$   $= \arg \max \left\{ \min_i \min_{j_1, j_2} k_{j_1 j_2} x_{ij_1} x_{ij_2} \right\}$ , який задовольняє обмеженням

$$\sum_{i=1}^p x_{ij} = 1, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad \sum_{j=1}^p x_{ij} \geq 1, \quad i = 1, 2, \dots, p,$$

де  $p$  - число кластерів,  $k_{i,j}$  - коефіцієнт кореляції між параметрами  $i$  і  $j$ .

Отримана задача може бути зведена до мінімаксної трьохіндексної біаксимальної транспортної задачі лінійного програмування.

Приведено кілька методів, які дозволяють підвищити точність прогнозування за умов використання нейромережевого апарату. Наведено методи раціонально розбиття множини даних на навчальну, тестову і контрольну вибірки, а також перетворення вхідних даних задля оптимального навчання ШНМ. Розглянуто питання ініціалізації матриці вагових коефіцієнтів ШНМ. Запропоновано два нових метода такої ініціалізації. Перший з них базується на вимозі ортогональності векторів входу для нейронів скритого шару (в роботі було розглянуто мережі з одним скритим шаром), в подальшому – ортогональний метод. Метою другого метода є максимізація мінімальної відстані між векторами виходів нейронів вхідного шару (під вектором виходу нейрона мається на увазі вектор, складений із ваг зв'язку цього нейрона з нейронами наступного шару), в подальшому – геометричний метод. У цьому разі вплив різних нейронів мережі на вихідний вектор різниться максимально, що дозволяє прискорити процедуру навчання мережі та запобігти дублюванню функцій одного нейрону другим нейроном, що в свою чергу дозволяє звести розмір мережі (а з ним і кількість параметрів, що їх треба налаштувати) до мінімуму.

**Третій розділ** роботи присвячено тестуванню теоретичних методів, які розроблено у другому розділі. Задля цього було проведено низку різноманітних імітаційних експериментів, які дозволяють порівняти розроблені методи із існуючими раніше при розв'язанні задач із малою вибіркою.

Для порівняння якості відновлення виду функціональної залежності для відсіченого та повного поліномів було згенеровано вибірку з 100 точок, які належать функції  $m$  похідних.

Зі зростанням порядку поліному досліджуване співвідношення зростає, однак і для поліномів другого порядку при  $m > 10$  точність прогнозування

відсіченим поліномом у кілька разів більша. Наведено аналіз залежності точності прогнозування від виду функції, що її відновлюють (логарифмічна, періодична, поліноміальна, тощо) та об'єму навчальної вибірки і зроблені висновки:

- відсічений поліном ефективніше за повний у разі потреби відновлення залежності будь-якого вигляду у разі, коли об'єм навчальної вибірки більший за кількість незалежних коефіцієнтів поліному менш ніж у 5 разів;
- за наявності більшої вибірки (у разі, коли її об'єм як мінімум на порядок більший за кількість незалежних коефіцієнтів у повному поліномі) повний і відсічений поліноми мають схожу точність прогнозування (результати відрізняються не більш ніж на 10%), але доцільніше використовувати повний поліном.

Ефективність запропонованої методики розбиття повної вибірки на навчальну, тестову та контрольну також була перевірена для різних об'ємів вибірки  $N$  і розмірності факторного простору задачі  $m$ . Критерієм якості методики вважалася середньоквадратична похибка прогнозування на спеціально вибраній множині, яке не було доступним для розбиття на навчальне, тестове та контрольне.

Застосування розробленої методики ефективно лише для  $N < 100$ , в інших випадках значення параметру  $\frac{E_{мет}}{E_{случ}}$  близько до одиниці (рис. 2). У випадку

$N < 100$  ефект, якого можна досягти від застосування методики тим більший чим більше розмірність факторного простору. Наприклад, при  $N = 100$ ,  $m = 10$  розроблена методика зменшує середньоквадратичну похибку прогнозування вдвічі.

Такого ж критерію було застосовано і при тестуванні методів ініціалізації ваг зв'язку в ШНМ. В якості тестової мережі була застосована трьохшарова мережа, з 6 нейронами у вхідному шарі, 4 – в скритому и 1 – в вихідному, яка була навчена із застосуванням алгоритму Левенберга-Марквардта. Було сформовано три матриці вагових коефіцієнтів із використанням трьох різних методів: заповнення невеликими випадковими числами (класичний метод), ортогональний метод и геометричний метод. Після навчання для кожної мережі було оцінено похибку прогнозування на тестовій множині (відповідно  $E_{случ}$ ,  $E_{орт}$  та  $E_{геом}$ ).

Найбільший ефект від запропонованої методики може бути досягнутий при невеликому об'ємі навчальної вибірки, проте навіть при достатньо великому об'ємі вибірки збільшення точності прогнозування може скласти 15-20%.

Проведено порівняльний аналіз розроблених методів кластерного аналізу. Для цього в імітаційному експерименті були використані не тестові, спеціально сгенеровані дані, а реальні дані задачі, яка потребує розв'язання. На першому кроці було проведено зменшення розмірності факторного простору із використанням кожного із методів, що досліджуються. На другому кроці було побудовано відсічений апроксимаційний поліном за допомогою якого були розраховані температури плавлення декількох жирів. За результатами

прогнозування, які показані на тестовій групі, було вибрано найбільш вдалий метод кластеризації. Незважаючи на те, що застосування кластерного аналізу підвищило точність прогнозування температури плавлення жирів, потрібна точність у цьому експерименті не була досягнута.

В цілому результати імітаційних експериментів показують, що всі методи, які запропоновано у другому розділі роботи, дозволяють підвищити точність відновлення функціональної залежності будь-якого виду. Цьому області застосування наведених методів є багата кількість задач прогнозування, керування, прийняття рішень, тощо.

**Четвертий розділ** роботи присвячено конструюванню системи підтримки прийняття рішень в автоматичній системі управління технологічним процесом синтезу жирів.

Особу увагу приділено побудові комбінованого алгоритму розрахунку температури плавлення жирів, в якому потужний нейромережевий механізм, що дозволяє апроксимувати функції будь-якого ступеню складності, однак потребуючий величезної навчальної вибірки, використовується задля корекції результатів прогнозування із використанням відсіченого квадратного поліному – механізму не настільки потужного, проте потребуючого набагато меншого об'єму навчальної вибірки.

Для вирішення задачі визначення температури плавлення різних триацилгліцеринів було застосовано відсічений поліном регресії, запропонований у другому розділі роботи. Також використано запропонований метод розбиття даних на навчальну, тестову і контрольну вибірки, а також нормування вхідних векторів системи (у цьому разі порядок величин, що обробляються, однаковий, і точність прогнозування збільшується). Побудований поліном дозволяє прогнозувати температуру плавлення будь-якого триацилгліцерину, який побудовано на базі 11 кислот, що їх розглянуто в роботі. Оцінка точності прогнозування з використанням тестової множини показала, що середньоквадратична похибка прогнозування складає  $2,18^{\circ}\text{C}$ . В роботі також наведені значення температури плавлення та її оцінки для триацилгліцеринів з тестової множини. Розв'язання цієї задачі дозволило перейти до вирішення задачі визначення температури плавлення жирів – сумішей різних триацилгліцеринів.

Традиційні методи розв'язання задачі прогнозування температури плавлення жирів (ШНМ, апроксимаційні поліноми) не дозволяють отримати оцінку температури плавлення з потрібною точністю. Застосування відсічених поліномів, спеціальних методів розбиття вибірки на навчальну тестову і контрольну та інших методів, запропонованих в роботі, дозволяє істотно підвищити точність прогнозування, проте для вирішення практичних задач виготовлення харчових жирів отримана точність також виявляється недостатньою. Тому для вирішення встановленої задачі було розроблено спеціальний механізм, що дозволяє об'єднати два принципово різних методи прогнозування – апроксимаційні поліноми і ШНМ у межах одного алгоритму. На першому етапі треба отримати дві різних оцінки температури плавлення жирів: одна – з використанням жирнокислотного складу, друга - з

використанням триацилгліцеринового складу. Вхідними даними алгоритму є: склад кожного із жирів, які досліджують, у вигляді 11-компонентного вектору (вміст різних кислот) -  $X^{(1)}$  і вектор температур плавлення цих жирів  $Y$ .

За допомогою запропонованого в роботі метода кластерного аналізу розмірність вектора складу зменшується до восьми. Далі будується відсічений апроксимаційний поліном. Зважаючи на малий об'єм вибірки було застосовано нестандартний підхід до формування тестової множини. В нього потрапляє лише один вектор. Усі інші вектори використовуються для побудови поліному. Тестовий вектор використовується для оцінки якості прогнозування. Далі в тестову множину обирається інший вектор, а поліном будується заново за допомогою нової навчальної вибірки. В такий спосіб можна оцінити якість прогнозування. Якщо коефіцієнти отриманих поліномів відрізняються незначно, то в результаті будь-який з одержаних поліномів можна використовувати як базовий. Цей поліном застосовується для визначення температур плавлення інших жирів.

Отриманий поліном дозволяє оцінити температури плавлення будь-якого жиру, виходячи з даних про його кислотний склад. Оцінка температури плавлення за допомогою триацилгліцеринового складу була отримана як зважене значення температур плавлення триацилгліцеринів, що входять до складу жиру (було використано оцінки температур плавлення триацилгліцеринів, отримані раніш).

Далі для уточнення температури плавлення жирів (отримані оцінки виявилися занадто грубими) було використано нейромережвий механізм. Усі триацилгліцерини було розподілено на три групи: з температурою плавлення в діапазоні  $[\hat{t}_{кисл} - \Delta t_1; \hat{t}_{кисл} + \Delta t_2]$ , з температурою плавлення, меншою за  $\hat{t}_{кисл} - \Delta t_1$  і з температурою плавлення більшою ніж  $\hat{t}_{кисл} + \Delta t_2$ , де  $\hat{t}_{кисл}$  - оцінка температури плавлення жиру по кислотному складу. Константи  $\Delta t_1$  і  $\Delta t_2$  було знайдено експериментальним шляхом. Вони дорівнюють  $\Delta t_1 = 7^\circ\text{C}$ ,  $\Delta t_2 = 6^\circ\text{C}$ . Триацилгліцерини із групи з найменшою температурою плавлення можна розглядати як каталізатори переходу до рідкого стану, а із групи з найбільшою температурою плавлення – як інгібітори. Крім того, для кожної з груп було знайдено частку ненасичених триацилгліцеринів (їх фізичні та хімічні показники значно відрізняються від показників насичених триацилгліцеринів). В результаті будь-який жир можна характеризувати концентрацією триацилгліцеринів кожної з отриманих груп (усього їх 6). Тому що сума цих концентрацій є константою, яка дорівнює одиниці, то будь-який жир можна охарактеризувати вектором із 5 концентрацій та двома оцінками температур плавлення – вектором із 7 компонентів. Цей вектор після нормування є входом ШНМ, виходом якої є скорегована температура плавлення жиру. Таким чином, на першому етапі функцію залежності температури плавлення жиру від складу шукають в класі поліномів другого порядку, а далі в окрісності точки, яку отримано, уточнюють значення за допомогою ШНМ (як відомо, ШНМ може моделювати функції будь-якої складності за умов достатнього об'єму навчальної вибірки).

При побудові ШНМ ініціалізація ваг зміщень проводилася згідно алгоритму, запропонованому в роботі ті описаному тут як геометричний. Точність прогнозування температури плавлення було перевірено як на тестовій множині, так і спеціальними експериментами. Середньоквадратична похибка прогнозування складає  $2,12^{\circ}\text{C}$ , що припустимо з точки зору постановки задачі, а також проблем, які поставлено зараз перед харчовою промисловістю. З часом кількість експериментальних даних буде зростати і середньоквадратична похибка зменшиться.

Проведено порівняння результатів роботи побудованої експертної системи з результатами, які можуть бути отримані із використанням метода Перкеля та планів Шефе (ці методики описано в першому розділі роботи). Якість роботи кожного із перелічених методів залежить від температури плавлення суміші, яку бажано отримати. Для метода, запропонованого Перкалем, необхідно використовувати константи, які отримано лише для 2-3 температур. В іншому разі константи можна отримати шляхом інтерполяції функції, при цьому точність прогнозування зменшується. Для методу, що використовує план Шефе, встановлюється діапазон, у якому точність прогнозування температури плавлення є досить високою, навколо цього діапазону можна отримати результати значно меншої точності, в інших інтервалах температур складання рецептур стає неможливим. Метод, який запропоновано в роботі, дозволяє отримувати достатньо точні прогнози в інтервалі температур  $10;45^{\circ}\text{C}$ .

Задача синтезу жирів із заданою температурою плавлення є центральною в розробленій системі підтримки прийняття рішень. Для вирішення цієї задачі розроблена схема управління для системи пошуку концентрацій інгредієнтів в суміші.

Запропонована схема передбачає наявність двох контурів управління. Перший контур призначений для вирішення задачі пошуку оптимального набору інгредієнтів із використанням статичної моделі визначення температури плавлення, яка описана раніше. Керуюча дія, що змінює вектор вхідних параметрів моделі задається за допомогою метода оптимізації, який дозволяє відшукати екстремум функціоналу якості. Результатом роботи у контурі є перехід у факторному просторі від початкової точки пошуку до околу заздалегідь визначеної міри точки, що доставляє мінімум запропонованому функціоналу якості. Другий контур потрібен для практичної перевірки отриманої рецептури. Якщо температура плавлення речовини, отриманої експериментально, відповідає вимогам задачі із заданою точністю, то процес пошуку рецептури закінчується. В іншому разі проводиться корекція моделі визначення температури плавлення із використанням даних, які отримано в результаті експерименту.

Зважаючи на те, що функцію залежності температури плавлення жиру від складу задано неявно (визначається за допомогою ШНМ), то для управління у першому контурі можна використовувати лише методи оптимізації нульового порядку. Тому для розв'язання задачі було вибрано метод Нелдера-Міда, який є одним з найкращих методів оптимізації за даних умов.

Будь-які обмеження та додаткові вимоги переводять задачу в клас задач оптимізації з обмеженнями, добре досліджений в літературі. В роботі (а також у додатку В до неї) поставлено та розв'язано кілька задач з різноманітними обмеженнями. Як результат було отримано рецептури заміни молока молочного жиру, жиру для шарового тіста та жиру, який використовується як начинка для цукерок. Для всіх отриманих рецептур було проведено лабораторні дослідження, у яких по отриманих рецептурах були отримані жири та експериментальним шляхом встановлено їх температури плавлення. Похибка оцінки температури плавлення в жодному експерименті не перевищила  $2^{\circ}\text{C}$ , що відповідає вимогам до методики, яку треба розробити.

В **додатках** наведено приклади практичного застосування алгоритмів та методик, запропонованих у роботі як в задачах визначення температури плавлення триацилгліцеринів і жирів, так і в задачі синтезу жирів із потрібними властивостями. Додаток Д містить акт про впровадження результатів дисертаційної роботи.

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішена актуальна науково-практична задача побудови системи підтримки прийняття рішень в автоматизованій системі управління на прикладі технологічного процесу синтезу жирів. Основні результати і висновки дисертаційної роботи полягають у наступному:

1. Виконано аналіз методів відновлення виду функціональної залежності класу “склад-властивість” в умовах малої вибірки. Знайдено найбільш прийнятні методи для вирішення задачі оцінювання властивостей за умов екстремально малої вибірки, визначено недоліки кожного з методів.
2. Розроблено перспективні підходи до вирішення задачі відновлення виду функціональної залежності в умовах екстремально малої вибірки. Запропоновано ефективний вид функціоналу зв'язку – відсічений апроксимаційний поліном, який дозволяє застосовувати регресійні поліноми в задачах оцінювання параметрів в умовах екстремально малої вибірки за рахунок зменшення кількості параметрів, які треба оцінити, у кілька разів в залежності від розмірності факторного простору задачі. Наведено методику розрахунку вектору оптимальних значень незалежних коефіцієнтів такого поліному.
3. Удосконалено наступні блоки методів відновлення виду функціональної залежності з метою підвищення точності прогнозування за умов екстремально малого об'єму навчальної вибірки:
  - розробка процедури розбиття даних на навчальну, тестову та контрольну вибірки, що дозволяє на 20-50% зменшити середньоквадратичну похибку в задачах оцінювання в умовах екстремально малої вибірки;
  - створення двох процедур ініціалізації матриці вагових коефіцієнтів ШНМ, які дозволяють підвищити якість навчання (середньоквадратична похибка в задачах оцінювання зменшується на 10-30%).

Впроваджені удосконалення є універсальними і можуть бути застосовані при вирішенні будь-яких задач оцінювання та прогнозування.

4. Удосконалено методи вирішення задач класу “склад-властивість” в умовах малої вибірки на прикладі визначення температури плавлення триацилгліцеринів та жирів в залежності від їх складу.
5. На базі взаємодії апроксимаційного та нейромережевого підходів до вирішення задачі оцінювання розроблено математичну модель для прогнозування властивостей композиційних сумішей.
6. Побудовано систему підтримки прийняття рішень в для знаходження оптимальної рецептури для синтезу жирів із потрібною температурою плавлення із заданого набору інгредієнтів.
7. Результати роботи (система підтримки прийняття рішень) були використані для впровадження у виробництво технології створення жирів із заданими властивостями в Українському науково-дослідному інституті олій та жирів.

## **СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ**

1. Раскин Л.Г., Демидов В.И. Рациональное структурирование данных при обучении нейронных сетей. // Вісник Національного технічного університету “ХПІ”. – Харків:НТУ „ХПІ”. – 2002. - №13. – С. 27-30.

Здобувачем запропоновано методику розбиття вибірки на навчальну, тестову та контрольну.

2. Криволапов А.Н., Демидов В.И. Применение методов регрессионного анализа и кластеризации для прогнозирования свойств переэтерифицированных жиров. // Вісник Національного технічного університету “ХПІ”. – Харків:НТУ „ХПІ”. – 2003. - №11, ч.2. – С. 44-47.

Здобувачем запропонована модель оцінки температури плавлення жирів, яка використовується в дисертації для отримання грубої оцінки температури плавлення.

3. Раскин Л.Г., Серая О.В., Демидов В.И. Сравнение эффективности методов построения усеченных уравнений полиномиальной регрессии. // АСУ и приборы автоматики. – Харьков: ХНУРЭ. – 2004. - №126. - С. 111-116.

Здобувачем запропоновано новий засіб вирішення задач прогнозування – відсічений поліном. Проведене порівняння якості прогнозування відсіченим поліномом і традиційним – повним.

4. Раскин Л.Г., Демидов В.И. Комбинирование нейросетевого и аппроксимационного подходов в решении задачи многопараметрического прогнозирования. // Вісник Національного технічного університету “ХПІ”. – Харків:НТУ „ХПІ”. – 2003. - №18. – С. 105-110.

Здобувачем запропоновано модель взаємодії нейромережевого ті апроксимаційного методів рішення задачі прогнозування.

5. Раскин Л.Г., Демидов В.И. Сравнительный анализ методов аппроксимации функций многих переменных в условиях малой выборки. // Вісник Національного технічного університету “ХПІ”. – Харків:НТУ „ХПІ”. – 2003. - №21. – С. 187-190.

Здобувачем проведено порівняльний аналіз якості прогнозування існуючими апроксимаційними поліномами (у тому числі і відсіченим) у задачах з екстремально малою вибіркою.

6. Везуб Н.В., Чернышев А.А., Демидов В.И. Прогнозирование шероховатости поверхности и оптимальных параметров лезвийной обработки оптических полимерных изделий при помощи нейронных сетей. // Резание и инструмент в технологических системах. – Харьков:НТУ „ХП”. -2004. - № 66. - С. 217-222.

Здобувачем застосовано розроблений в дисертації математичний апарат для розв’язання задачі прогнозування параметрів лезвійної обробки.

7. Криволапов А.Н., Демидов В.И. Использование новых принципов кластеризации для построения модели “состав-свойство” для переэтерифицированных жиров // Вісник Національного технічного університету “ХП”. – Харків:НТУ „ХП”. -2005. - № 25. - С. 155-158.

Здобувачем запропоновано нові методи кластеризації.

8. Раскин Л.Г., Демидов В.И. Регрессионный анализ свойств сложных химических соединений в зависимости от состава. //Системи автоматики та автоматичне керування: матеріали науково-технічної конференції студентів, аспірантів та молодих учених. – Севастополь. – 2003. – С. 48-51.

Здобувачем запропоновано алгоритм розв’язання задачі знаходження температури плавлення жирів за допомогою регресійного аналізу.

9. Демидов В.И., Криволапов А.Н., Демидов И.Н. Использование математического моделирования при получении жиров с заданными свойствами // Олійножировий комплекс. – Дніпропетровськ :АПК-Інформ. – 2004. - №2. – С. 65-66.

Здобувачем проведено порівняльний аналіз якості прогнозування з допомогою нейромережового моделювання з методом, який використовує плани Шеффе.

## АНОТАЦІЇ

**Демидов В.І.** Система підтримки прийняття рішень в автоматизованій системі управління технологічним процесом синтезу жирів із потрібними властивостями. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 05.13.07 – автоматизація технологічних процесів. Національний технічний університет “Харківський політехнічний інститут”, Харків, 2007.

Дисертація присвячена побудові системи підтримки прийняття рішень в автоматизованій системі управління технологічним процесом синтезу жирів. В роботі проведено порівняльний аналіз існуючих методів оцінювання властивостей по наявній інформації про состав речовин за умов екстремально малої вибірки. Запропоновано новий вид функціоналу зв’язку – відсічений апроксимаційний поліном, який дозволяє застосовувати регресійні поліноми в задачах оцінювання параметрів в умовах екстремально малої вибірки за рахунок зменшення кількості параметрів, які треба оцінити, у кілька разів. Побудовано



механізм взаємодії апроксимаційного та нейромережевого підходів до вирішення задачі відновлення виду функціональної залежності. Розроблені нові процедури розбиття множини даних на навчальну, тестову і контрольну вибірки та ініціалізації матриці вагових коефіцієнтів штучної нейронної мережі, які дозволяють підвищити точність оцінювання властивостей речовин в умовах малої вибірки, та прискорюють роботу метода в цілому.

Перелічені розробки було покладено в основу системи підтримки прийняття рішень при параметричному синтезі жирів. Збудована система дозволяє вирішувати задачі оцінювання температури плавлення триацилгліцеринів і композиційних харчових жирів, а також складання рецептури жирів із потрібною температурою плавлення з відомого набору інгредієнтів.

Проведено практичну апробацію розробленої системи.

**Ключові слова:** система підтримки прийняття рішень, управління технологічними процесами, моделювання систем управління, ідентифікація параметрів об'єктів.

**Демидов В.И.** Система поддержки принятия решений в автоматизированной системе управления технологическим процессом синтеза жиров с требуемыми свойствами. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.07 – автоматизация технологических процессов. Национальный технический университет “Харьковский политехнический институт”, Харьков, 2007.

Диссертация посвящена построению системы поддержки принятия решений в автоматизированной системе управления технологическим процессом синтеза жиров. В работе проведен сравнительный анализ существующих методов оценивания свойств веществ по информации об их составе в условиях экстремально малой выборки. Предложен новый вид функционала связи – усеченный аппроксимационный полином, который позволяет применять регрессионные полиномы в задачах оценивания параметров в условиях экстремально малой выборки за счет уменьшения количества оцениваемых параметров в несколько раз. В разработанной структуре полинома количество оцениваемых параметров линейно зависит от размерности факторного пространства, что не вызывает лавинообразного роста количества оцениваемых параметров при увеличении размерности задачи, как это происходит при использовании классических регрессионных полиномов. Построен механизм взаимодействия аппроксимационного и нейросетевого подходов к решению задачи восстановления вида функциональной зависимости. Разработана новая процедура разделения множества данных на обучающую, тестовую и контрольную выборки. Применение процедуры позволяет на 20-50% снизить среднеквадратическую ошибку в задачах оценивания. Предложен новый механизм инициализации матрицы весовых коэффициентов искусственной нейронной сети, основанный на ортогонализации векторов входа нейронов скрытого слоя, который позволяет повысить точность оценивания свойств веществ в условиях малой выборки на 10-30% и сокращает время обучения

нейронной сети. Указанные механизмы и процедуры являются универсальными и могут быть использованы в любых задачах оценивания и прогнозирования как вместе, так и отдельно друг от друга.

Перечисленные разработки легли в основу системы поддержки принятия решений, позволяющей решать ряд важных для пищевой промышленности Украины задач: оценивания температуры плавления индивидуальных триацилглицеринов и композиционных пищевых жиров, а также составления рецептуры жиров с требуемыми свойствами из известного набора ингредиентов.

Проведена практическая апробация разработанной системы.

**Ключевые слова:** система поддержки принятия решений, управление технологическими процессами, моделирование систем управления, идентификация параметров объектов.

**Demydov V.** Decision support systems in the automated control system of technological process of fats with demanded properties synthesis. – Manuscript.

Thesis for a candidate's degree of technical sciences by specialty 05.13.07 - Automation of technological processes. National technical university "Kharkov polytechnical institute", Kharkov, 2007.

The dissertation is dedicated to building of decision support system in an automated control system of food fat synthesizing technological process. The comparative analysis of existing methods of matter's properties estimation on its composition data for case of extremely small sampling number is done. The new kind of a linking functional - truncated approximating polynomial is proposed. It allows to apply regression polynomials to tasks where sampling number is extremely small. Mechanism of artificial networks and approximation polynomials interaction is developed. New procedure for artificial neural network weight factors matrix initialization which allows to train a network more quickly and to receive greater accuracy of forecasting. Technique of general sample splitting on training test and control samples which raises accuracy of all types forecasting methods.

These ideas are lies in a ground of a decision support system that permits to decide a series of relevant tasks for Ukrainian food-processing industry. There are determining of fats melt point temperature and making compounding of fats with demanded properties of the determinate components set.

Also designed system practical approbation was done

**Keywords:** decision support system, technological processes control, control system modeling, identification of objects' parameters.