

ВЫВОДЫ

1. Оптимальными условиями получения растворов полисульфидов натрия можно считать следующие: $t, ^\circ\text{C} - 80 \div 90$; время перемешивания, мин — 30—40; интенсивность перемешивания мешалкой, об/мин — 660—800; концентрация исходного раствора NaOH, % — 10—46; отношение S : NaOH — 2; размеры зерен серы, мм — 0,25—2,0.

2. Концентрация полисульфидных растворов зависит от исходной концентрации NaOH.

3. Концентрированные растворы полисульфидов натрия, получаемые при растворении из элементарной серы и 30—60%-ного растворов NaOH при оптимальных условиях, содержат, г/л: S_{пол.} — 252—265; Na₂CO₃ — 180—204; Na₂S₂O₃ — 151—155; NaHS — 66—123; H₂S — 72—75.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Получение роданистого натрия для производства волокна нитрон. — «Кокс и химия», 1963, № 6, с. 34. Авт.: М. С. Литвиненко, М. Б. Хват, А. И. Бродович, И. Л. Кроник, Н. Я. Перцева, Н. М. Перман.
2. К вопросу выбора метода очистки коксового газа от цианистого водорода. — «Кокс и химия», 1974, № 6, с. 36—38. Авт.: М. С. Литвиненко, В. Н. Зайченко, А. М. Ахтырченко, Н. И. Шилина, И. М. Давиденко, Г. Н. Лебедева, Л. Е. Карлинский.
3. Зайченко В. М., Владимирова И. И., Корюнин А. А. Способ утилизации цианистого водорода коксового газа. — «Кокс и химия», 1974, № 7, с. 39.

Поступила 15 сентября 1975 г.

УДК 62—5.001.57:519.92

Н. Н. МАЛЬЦЕВ, канд. техн. наук, Г. И. МАНКО

ИНФОРМАЦИОННАЯ ОЦЕНКА АДЕКВАТНОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ОПИСАНИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

При составлении математического описания (идентификации) технологического процесса с помощью пассивного эксперимента возникает необходимость оценки адекватности полученных уравнений регрессии, т. е. оценки соответствия их опытным данным. Применяемые обычно в качестве критериев адекватности F -отношение [1] и γ -критерий [2] не дают возможности оценить, насколько точно данное уравнение описывает идентифицируемый процесс, они лишь показывают, насколько предсказание значений выходной величины процесса с помощью данного уравнения точнее предсказания по среднему значению выходной величины. Получаемая с помощью указанных критериев оценка адекватности зависит от дисперсии выходной переменной относительно своего среднего значения, т. е. одно и то же уравнение может иметь разные оценки адекватности при разных значениях дисперсии выходной величины.

Более точными являются оценки, определяющие объем информации об изучаемом процессе, содержащейся в математической модели процесса. Для случая экспериментов по поиску наилучшей модели в работе [3] приведены формулы подсчета прироста информации в каждом эксперименте и методика планирования дискриминирующих экспериментов, т. е. экспериментов, позволяющих выбрать из нескольких математических описаний наиболее адекватное. Необходимость проведения дискриминирующих экспериментов и относительно большой объем вычислений затрудняют применение этого метода.

В настоящей работе предлагается удобная для практического использования оценка адекватности, основанная на понятии полезной информации Бонгарда [4]. Применительно к задачам идентификации технологических процессов интерпретируем понятие полезной информации следующим образом. Пусть имеется некоторый объект (процесс), состояние которого описывается набором выходных переменных $y_1(t), y_2(t), \dots, y_n(t)$. Пусть также имеется математическая модель этого объекта, согласно которой выходными переменными являются величины $\hat{y}_1(t), \hat{y}_2(t), \dots, \hat{y}_n(t)$.

Выходная величина $y_j(t)$ может принимать значения y_{ji} с вероятностями $p(y_{ji})$. Неопределенность величины $y_j(t)$ оценивается с помощью энтропии Шеннона:

$$H(y_j) = - \sum_i p(y_{ji}) \log p(y_{ji}). \quad (1)$$

Выходная величина модели $\hat{y}_j(t)$ является функцией случайных аргументов $x_1, x_2, \dots, x_k$, представляющих собой входные воздействия объекта. Распределение вероятностей этой функции при фиксированном наборе входных величин зависит только от того, каким образом эти величины входят в анализируемое уравнение. Следовательно, если модель адекватна исследуемому объекту, распределение вероятностей выходной величины модели мало отличается от распределения вероятностей выходной величины объекта. Обозначим вероятность принятия величиной $\hat{y}_j(t)$ значения y_{ji} через $q(y_{ji})$ и будем говорить, что рассматриваемая модель выдвигает гипотезу о том, что j -я выходная величина имеет распределение вероятностей $Q = \{q(y_{ji})\}$, в то время как реальным распределением является распределение $P = \{p(y_{ji})\}$. Согласно [4] для наблюдателя, исходящего из такой гипотезы, неопределенность j -й выходной величины равна

$$N(y_j) = - \sum_i p(y_{ji}) \log q(y_{ji}). \quad (2)$$

При изменении неопределенности выходной величины с $N_1(y_i)$ на $N_2(y_i)$ наблюдатель получает некоторое количество полезной информации, определяющееся следующим образом:

$$I = N_2(y_i) - N_1(y_i). \quad (3)$$

Процесс идентификации можно рассматривать как процесс запаса информации об идентифицируемом объекте. Чем точнее данное уравнение описывает объект, тем больше содержащийся в этом уравнении запас полезной информации. За нулевой уровень можно принять запас информации в уравнении, выдвигающем гипотезу о том, что все значения y_{ji} величины $y_j(t)$ равновероятны:

$$q(y_{ji}) = \frac{1}{m}. \quad (4)$$

Здесь m — общее число возможных значений переменной $y_j(t)$.

Неопределенность величины $y_j(t)$ для наблюдателя, исходящего из гипотезы (4), получается равной

$$N_0(y_j) = - \sum_{i=1}^m p(y_{ji}) \log \frac{1}{m} = \log m. \quad (5)$$

Тогда запас полезной информации в уравнении, которому соответствует неопределенность $N(y_j)$, определится выражением

$$I_j = \log m - N(y_j). \quad (6)$$

Энтропия $H(y_j)$ есть частный случай неопределенности $N(y_j)$, имеющий место при полной адекватности уравнения. Следовательно, максимально возможный запас полезной информации в уравнении вычисляется по формуле

$$I_{j \max} = \log m - H(y_j). \quad (7)$$

Отношение запаса полезной информации, содержащегося в уравнении, к максимально возможному дает числовую оценку адекватности уравнения:

$$\eta_j = \frac{I_j}{I_{j \max}} = \frac{\log m - N(y_j)}{\log m - H(y_j)}. \quad (8)$$

Приведем некоторые примеры использования коэффициента η .

1. Известно, что с ростом порядка полиномиального уравнения повышается в общем случае степень адекватности уравнения. Последовательно оценивая с помощью (8) адекватность уравнений первого порядка, неполного квадратичного, полного квадратичного и т. д., можно выбрать уравнение, имеющее наряду с низким порядком достаточно высокую степень адекватности. При этом возникает вопрос, какое значение коэффициента η можно считать достаточным. Для ответа на этот вопрос следует на основании требований, предъявляемых к точности управления объектом, вычислить минимальное допустимое значение $\eta_{\min}$.

2. Предложенная оценка адекватности определяет не абсолютно значение запаса информации в модели, а то, насколько этот запас близок к максимально возможному. Следовательно, появляется возможность количественного сравнения степени адекватности моделей, полученных разными методами или на основании разных исходных данных.

Для объектов, описываемых n выходными величинами, общая оценка адекватности подсчитывается следующим образом:

$$\eta = \sum_{j=1}^n C_j \eta_j, \quad (9)$$

где η_j — оценка адекватности уравнения, описывающего переменную $y_j(t)$; C_j — коэффициент, учитывающий важность информации о величине y_j для целей управления объектом ($\sum_j C_j = 1$).

Предлагаемая оценка адекватности может быть широко использована при решении задач идентификации сложных процессов химической технологии, таких, как каталитический риформинг бензинов, получение сырого бензола, бессатураторный метод производства сульфата аммония и др.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рузинов Л. П. Статистические методы оптимизации химических процессов. М., «Химия», 1972. 200 с.
2. Бородюк В. П., Лецкий Э. К. Статистическое описание промышленных объектов. М., «Энергия», 1971. 112 с.
3. Федоров В. В. Теория оптимального эксперимента. М., «Наука», 1971. 312 с.
4. Бонгард М. М. Проблема узнавания. М., «Наука», 1967. 320 с.

Поступила 22 мая 1975 г.