CUPRINS

1. Optimalitate 1
1.1. Optimizare
1.2. Formularea şi clasificarea problemelor de optimizare
1.3. Etapele rezolvării problemelor de optimizare
1.4. Condiţii de optimalitate
1.5. Concavitate – convexitate
1.5.1. Funcţii convexe şi concave
1.5.2. Mulţimi convexe

2. Metode analitice 13
2.1. Regresia liniară
2.2. Analiza statistică
2.3. Regresia polinomială
2.3.1. Rezolvarea problemei de regresie polinomială
2.3.2. Studiu de caz. Caracteristica statică a traductorului de debit
2.4. Regresia multiplă liniară
2.4.1. Principii teoretice
2.4.2. Aplicaţie. Determinarea modelului matematic staţionar al procesului de stabilizare a benzinei

3. Algoritmi de optimizare unidimensională 37
3.1. Metoda explorării exhaustive
3.1.1. Algoritmi de explorare exhaustivă
3.1.2. Studiu de caz. Reglarea optimală a combustiei în cuptoare tubulare
3.2. Metode de eliminare
3.2.1. Principiul metodelor de eliminare
3.2.2. Algoritmul perechilor secvenţiale
3.2.3. Algoritmul Fibonacci
3.2.4. Metoda secţiunii de aur
3.2.5. Studiu de caz. Conducerea optimală a unei coloane de fracţionare
3.3. Metode de interpolare
3.3.1. Principiul metodelor de interpolare
3.3.2. Algoritmi din clasa metodelor de interpolare

1. OPTIMALITATE

1.1. Optimizare

Optimizarea reprezintă activitatea de *selectare*, din mulțimea soluțiilor posibile unei probleme, a acelei soluții care este cea mai bună]n raport cu un criteriu predefinit. Această definiție implică existența următoarelor componente:

1. O problemă tehnică constând în calculul matematic al unei soluții;
2. Existența mai multor soluții pentru aceeaşi problemă;
3. Un criteriu de selectare a soluției optime.

Funcția obiectiv reprezintă expresia matematică a criteriului de optimizare. Aceasta trebuie să reflecte eficiența economică a procesului şi în acelaşi timp să răspundă obiectivelor funcționării oricărui proces chimic: siguranța în exploatare şi respectarea condițiilor de calitate.

Problema de optimizare reprezintă o aplicație matematică de selectare a unei soluții, dintr-o mulțime posibilă, pe baza evaluării funcției obiectiv. Foarte multe probleme din domeniile matematicii, statisticii, ingineriei, economiei şi ştiințelor aplicate se pot formula ca probleme de optimizare.

Un domeniu în care optimizarea intervine adesea este *modelarea matematică* a fenomenelor. }n acest context, determinarea structurii şi parametrilor modelelor se face prin rezolvarea unor probleme de optimizare ă36, 37î. De asemenea, în majoritatea cazurilor, procedurile de luare a deciziilor utilizează tehnici de optimizare în vederea determinării celei mai bune variante. Pe lângă aceste aplicații, problemele de optimizare apar deseori ca subprobleme într-o serie de proceduri numerice.

Automatizarea s-a dezvoltat în principal ca o tehnică de optimizare, întrucât s-a constatat că o automatizare care nu este proiectată în mod corespunzător poate conduce la rezultate mai dezavantajoase decât în absența automatizării respective. Acest fapt poate fi ilustrat în mod simplu

prin faptul că o buclă de reglare automată care nu respecta condiția de stabilitate nu poate fi utilizată în practica industrială.

Tendințele de a asigura performanțe din ce în ce mai bune ale sistemelor automate - în regimuri staționare şi tranzitorii - au asigurat un loc central problemelor de optimizare în cadrul automaticii şi al aplicațiilor acesteia, automatizările industriale. Astfel, dacă pentru un sistem de reglare automată (SRA), asupra căruia acționează aceleaşi perturbații, pot fi determinate mai multe valori ale comenzilor, prin aplicarea optimizării se pot determina valorile optime ale comenzilor.

Optimizarea în automatică presupune următoarele componente:

- un sistem de reglare automată;
- existența, pentru aceeaşi problemă, a mai multor valori ale comenzilor;
- o funcție obiectiv asociată sistemului automat;
- un algoritm de determinare a soluției optime.

1.2. Formularea şi clasificarea problemelor de optimizare

Rezolvarea unei probleme de optimizare implică *minimizarea* sau maximizarea unei *funcții obiectiv*, prin găsirea valorilor optime ale argumentelor sale. Problema de optimizare în forma ei cea mai generală, este problema cu restricții neliniare (**PRN**)

$$\min\left\{F(\boldsymbol{X}) \middle| c_i(\boldsymbol{X}) = 0,\ i = 1,\ldots,m';\ c_i(\boldsymbol{X}) \geq 0, i = m'+1,\ldots,m\right\} \tag{1.1}$$

unde funcția obiectiv $F : \Re^n \to \Re$ şi funcțiile restricții $c_i : \Re^n \to \Re,\ i = 1,\ldots,m$ constituie împreună funcțiile problemei de optimizare**.** O problemă de maximizare se poate pune imediat în forma standard **PRN,** prin schimbarea semnului funcției obiectiv. Se presupune că în toate cazurile funcțiile restricții sunt cel puțin continue.

Marea majoritate a problemelor de optimizare se pot exprima în forma standard PRN. Cu toate acestea, existența unei reprezentări standard, foarte generale, nu presupune ignorarea deosebirilor existente între diferite probleme. Un algoritm care poate rezolva PRN generală, cu funcțiile problemei considerate neliniare, este de regulă ineficient când se utilizează pentru rezolvarea unor probleme cu caracteristici speciale. Din acest motiv, pentru orice problemă este avantajos să se evidențieze toate trăsăturile particulare care ar putea să conducă la o rezolvare mai uşoară. Clasificarea problemelor de optimizare are în vedere în primul rând creşterea eficienței metodelor de rezolvare prin exploatarea unor proprietăți speciale.

Clasificarea cea mai des folosită are la bază *proprietățile matematice* ale funcțiilor problemei de optimizare ă31î. Tabelul 1.1 prezintă o astfel de clasificare, în care s-au avut în vedere avantajele algoritmice ce decurg din fiecare combinație posibilă. Alte aspecte pot de asemenea interveni în clasificarea problemelor de optimizare. Astfel, *dimensiunea problemei* are implicații importante asupra eficienței rezolvării. }n afara cazului unei singure variabile – problemă care se tratează întotdeauna ca un caz special - o delimitare intervine când dimensiunea problemei este atât de mare încât datele nu pot fi reținute în memoria de lucru a calculatorului.

Tabelul 1.1

Clasificarea problemelor de optimizare

Proprietăți pentru F(x)	Proprietăți pentru c_i (x)
Funcție de o variabilă	Fără restricții
Funcție liniară	Margini simple pentru variabile
Sumă de pătrate de funcții liniare	Funcții liniare
Funcție pătratică	Funcții neliniare diferențiabile
Sumă de pătrate de funcții neliniare	Funcții neliniare nediferențiabile
Funcție neliniară diferențiabilă	
Funcție neliniară nediferențiabilă	

Un alt aspect cu implicații importante asupra eficienței rezolvării este *informația disponibilă* pe durata calculelor. De exemplu, într-un caz putem să evaluăm analitic derivatele de ordinul unu şi doi ale funcției obiectiv, pe când în alt caz sunt disponibile numai valorile funcției. }n primul caz eficiența rezolvării este mult sporită față de cel de al doilea caz.

1.3. Etapele rezolvării problemelor de optimizare

Rezolvarea problemelor de optimizare necesită parcurgerea următoarelor etape:

a) elaborarea modelului matematic al sistemului;
b) stabilirea expresiei matematice a funcției obiectiv;
c) determinarea numerică a optimului.

Modelul matematic al procesului reprezintă un sistem de relații ce consemnează interdependențele existente între cele n variabile x_j ale procesului:

$$h_j\left(x_1, x_2, \ldots, x_j, \ldots, x_{m'}\right) = 0, \quad j = 1, \ldots, m'; \tag{1.2}$$

$$g_j\left(x_1, x_2, \ldots, x_j, \ldots, x_{m'}\right) \leq 0, \quad j = m' + 1, \ldots, m. \tag{1.3}$$

În procesul de optimizare sau de conducere optimală a unui sistem, este deosebit de importantă etapa de elaborare matematică a procesului, sarcină ce revine în exclusivitate specialistului din domeniul respectiv. Eforturile făcute pentru a optimiza un sistem (proces) al cărui model nu descrie corect ceea ce se întâmplă în realitate sunt evident nejustificate. Din acest motiv, în cele mai multe cazuri, efortul principal şi volumul cel mai important de muncă din cadrul unei probleme de optimizare este îndreptat spre cunoaşterea sistemului şi descrierea sa cantitativă. Urmărind în primul rând obținerea unui model complet, prin includerea tuturor interdependențelor şi limitărilor semnificative, analistul nu trebuie să piardă din vedere posibilitățile de simplificare şi în primul rând evitarea redondanței informațiilor şi a eventualelor incompatibilități între acestea. În practică, este recomandat să se realizeze un compromis rezonabil între complexitatea, respectiv fidelitatea modelului şi uşurința de soluționare a acestuia, ținând seama de faptul că, în cadrul celor mai multe metode de căutare a optimului, modelul matematic asociat funcției obiectiv este evaluat de zeci de ori.

Expresia matematică a funcției obiectiv constă în reprezentarea sub forma analitică a criteriului de optimizare, prin intermediul unei funcții implicite sau explicite

$$F_{ob} = f\left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right). \tag{1.4}$$

În problemele legate de sfera producției materiale, funcția f este de natură economică, reflectând pe cât posibil, corect şi complet, eficiența economică a desfăşurării procesului. La determinarea expresiei matematice a funcției obiectiv trebuie respectate o serie de principii cum ar fi: unicitatea, controlabilitatea, orientarea pe indicatori ai rentabilității procesului, unimodalitatea funcției.

Principiul unicității presupune formularea problemei de optimizare pe baza utilizării unei singure funcții obiectiv. În cazul în care se impune utilizarea mai multor funcții obiectiv, acestea trebuie exprimate prin una singura, de dorit, prin intermediul combinațiilor liniare.

Controlabilitatea implică utilizarea în cadrul funcției obiectiv a acelor variabile care să poată fi manipulate de către operator sau calculator.

Unimodalitatea funcției obiectiv este legată de existența în domeniul de căutare, a unui singur extrem, ce poate fi situat chiar pe frontiera domeniului.

Implicarea conducerii optimale în creşterea rentabilității instalației presupune înglobarea în funcția obiectiv a termenilor determinanți ai rentabilității: beneficiu, cost, calitate. Având în vedere importanța acestei etape în rezolvarea problemelor de optimizare, este necesar ca în activitatea practică să se țină seama de următoarele observații care conduc la subordonarea acestei etape față de etapa precedentă cât şi de cea ulterioară.

Observatii:

1. În căutarea optimului nu are importanță valoarea absolută a funcției obiectiv ci variația sa în raport cu parametrii sistemului. În consecință, este posibilă transformarea funcției obiectiv în scopul simplificării sau aducerii la o forma adecvată metodei alese pentru căutarea optimului.
2. În unele probleme de optimizare (în special din domeniul conducerii optimale a sistemelor chimice) funcția obiectiv nu depinde puternic, în zona învecinată optimului, de variabilele sistemului. Din acest motiv, în exprimarea cantitativă a termenilor funcției obiectiv nu este necesară o acurateţe deosebită, comparabilă celei cerute de ecuațiile modelului matematic.

Determinarea numerica a optimului pentru o problemă de optimizare, formulată prin relația (1.4) şi sistemul de ecuații şi inecuații (1.2) şi (1.3), constă în aflarea setului de valori $x_1^{opt}, x_2^{opt}, \ldots, x_n^{opt}$ ale variabilelor $x_i, i = 1, \ldots, n$, care conduce la cea mai mică (sau cea mai mare) valoare pentru funcția obiectiv f şi care satisface în acelaşi timp şi modelul matematic al sistemului, relațiile (1.2) şi (1.3). În consecință, soluția optimă reprezintă acea valoare a vectorului **X** al variabilelor care corespund condițiilor

$$\begin{cases} \min\limits_{X} f(\boldsymbol{X}) \\ h_j(\boldsymbol{X}) = 0;\ j = 1, \ldots, m' \\ g_j(\boldsymbol{X}) \le 0;\ j = m'+1, \ldots, m \end{cases} . \qquad (1.5)$$

În cadrul unei probleme de optimizare, valorile minime sau maxime ale funcției obiectiv reprezintă strict valorile cele mai mici sau cele mai mari ale funcției obiectiv, în condiții în care variabilele satisfac modelul matematic al procesului. Sensul acestei precizări rezultă clar din figura 1.1, în care valoarea minimă a funcției obiectiv nu coincide cu valoarea corespunzătoare a extremului funcției în absența modelului matematic.

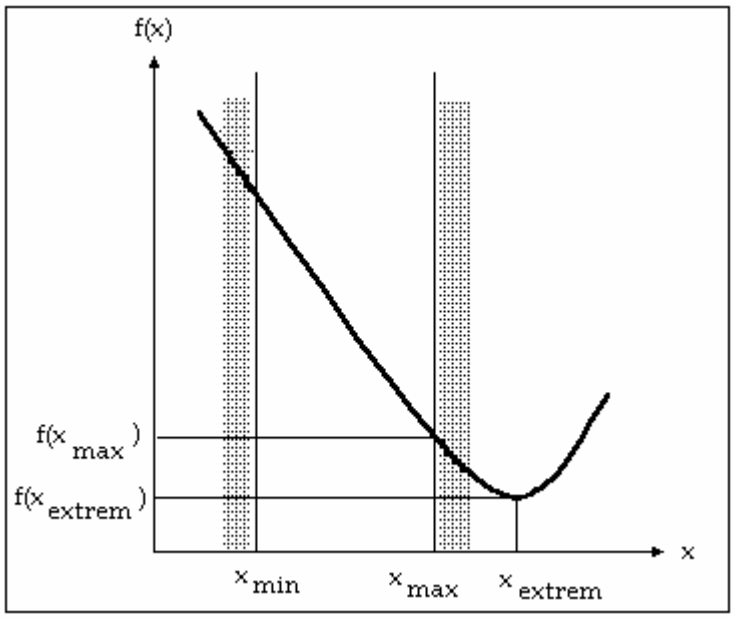


Fig. 1.1. Optimul şi extremul unei funcții.

1.4. Condiții de optimalitate

Fie $f(x)$ o funcție continuă şi continuu diferențiabilă pe domeniul $A \le x \le B$. Pentru orice punct a din acest interval, derivata de ordinul întâi este

$$\frac{df}{dx} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(a+\Delta x)}{\Delta x}. \tag{1.6}$$

Dacă derivatele de ordinul $2,3,\ldots,j-1$ sunt de asemenea funcții continue în domeniul menționat, iar derivata de ordinul j există în domeniul deschis (A,B), dezvoltarea funcției $f(x)$ în serie Taylor este

$$f(x) = f(a) + (x-a)\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=a} + \ldots + \frac{(x-a)^{j-1}}{(j-1)!}\left.\frac{d^{j-1}f}{dx^{j-1}}\right|_{x=a} + \frac{(x-a)^{j}}{j!}\left.\frac{d^{j}f}{dx^{j}}\right|_{x=a}. \tag{1.7}$$

Considerând $\Delta x = x - a$ se obține

$$f(a+\Delta x) - f(a) = \Delta x\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=a} + \frac{\Delta x^2}{2!}\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x=a} + \ldots \frac{\Delta x^j}{j!}\left.\frac{d^j f}{dx^j}\right|_{x=a}. \tag{1.8}$$

Condiția necesară ca $x = a$ să fie un optim local este ca derivata de ordinul întâi, $\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=a}$, să fie nulă. Demonstrația condiției necesare este

următoarea: dacă a este un minim local iar Δx are o valoare suficient de mică astfel încât $\Delta x^2 \approx 0, \Delta x^3 \approx 0, \ldots, \Delta x^j \approx 0$, relatia (1.8) se reduce la

$$f(a+\Delta x) - f(a) = \Delta x \left.\frac{df}{dx}\right|_{x=a}, \tag{1.9}$$

iar dacă $(df/dx)|_{x=a} \neq 0$ semnul lui Δx poate fi astfel ales încât $f(a+\Delta x) - f(a) < 0$, adică $f(a+\Delta x) < f(a)$, ceea ce contrazice faptul că a este un minim local.

Condiția de anulare a derivatei de ordinul întâi pentru un optim local *nu este suficientă***.** Astfel, dacă această derivată este nulă, dar Δx^2 nu are o valoare neglijabilă, ci doar termenii de grad mai mare decât 2 pot fi neglijați, din relația (1.8) rezultă

$$f(a+\Delta x) - f(a) = \frac{\Delta x^2}{2!} \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x=a}. \tag{1.10}$$

Dacă $\left(d^2 f / dx^2\right)|_{x=a} > 0$ rezultă $f(a+\Delta x) > f(a)$, deci a este un *minim local,* iar pentru $\left(d^2 f / dx^2\right)|_{x=a} < 0$, a este un *maxim local*.

Pentru $\left(d^2 f / dx^2\right)|_{x=a} = 0$, trebuie ca $\left(d^3 f / dx^3\right)|_{x=a}$ să fie zero, astfel Δx^3 îşi va schimba semnul odată cu schimbarea semnului lui Δx, iar primul termen semnificativ $\frac{\Delta x^3}{6}\left(d^3 f / dx^3\right)|_{x=a}$ va fi incompatibil cu presupunerea că punctul $x = a$ este un optim local.

Un punct a, în care prima şi a doua derivată sunt nule, $(df/dx)|_{x=a} = 0$ şi $\left(d^2 f / dx^2\right)|_{x=a} = 0$, iar derivata de ordinul trei respectă condiția $\left(d^3 f / dx^3\right)|_{x=a} \neq 0$, va fi un *punct de inflexiune* şi nu un optim local.

Definiție: Punctele pentru care derivata de ordinul întâi este nulă (optim local sau punct de inflexiune) poartă denumirea de *puncte staționare*.

Concluzie: Dacă prima derivată nenulă este de ordin par, punctul stationar considerat va fi *minim local,* dacă valoarea derivatei respective în acel punct este pozitivă sau *maxim local* dacă este negativă. Dacă prima derivată nenulă este de ordin impar, punctul staționar este *punct de inflexiune***.**

Studiu de caz. Se consideră o funcție continuă şi continuu diferențiabilă pe domeniul $x \in \Re$ ă9î

$$f(x) = \frac{1}{4}x^4 - \frac{5}{3}x^3 + \frac{7}{2}x^2 - 3x + 3. \qquad (1.11)$$

Expresia derivatei de ordinul 1 este

$$df/dx = x^3 - 5x^2 + 7x - 3. \qquad (1.12)$$

Punctele în care prima derivată se anulează sunt soluțiile ecuației $df/dx = 0$. Prin rezolvarea ecuației (1.12) se obțin soluțiile: $x_1 = x_2 = 1$ şi $x_3 = 3$.

Expresia derivatei de ordinul 2 este

$$d^2 f/dx^2 = 3x^2 - 10x + 7. \qquad (1.13)$$

Analizând valorile derivatei de ordinul 2 în punctele staționare $x_1 = 1$ şi $x_3 = 3$ se obține $\left(d^2 f/dx^2\right)\Big|_{x=1} = 0$ şi $\left(d^2 f/dx^2\right)\Big|_{x=3} = 4 > 0$. În consecință, pentru $x = 1$, prima derivată nenulă este derivata de ordinul 3, $\left(d^3 f/dx^3\right)\Big|_{x=1} = 6x - 10 = -4$, iar punctul considerat este un punct de inflexiune**.** Pentru $x = 3$, prima derivată nenulă este de ordin par iar punctul considerat este un punct de minim**.** O imagine sugestivă este prezentată în figura 1.2.

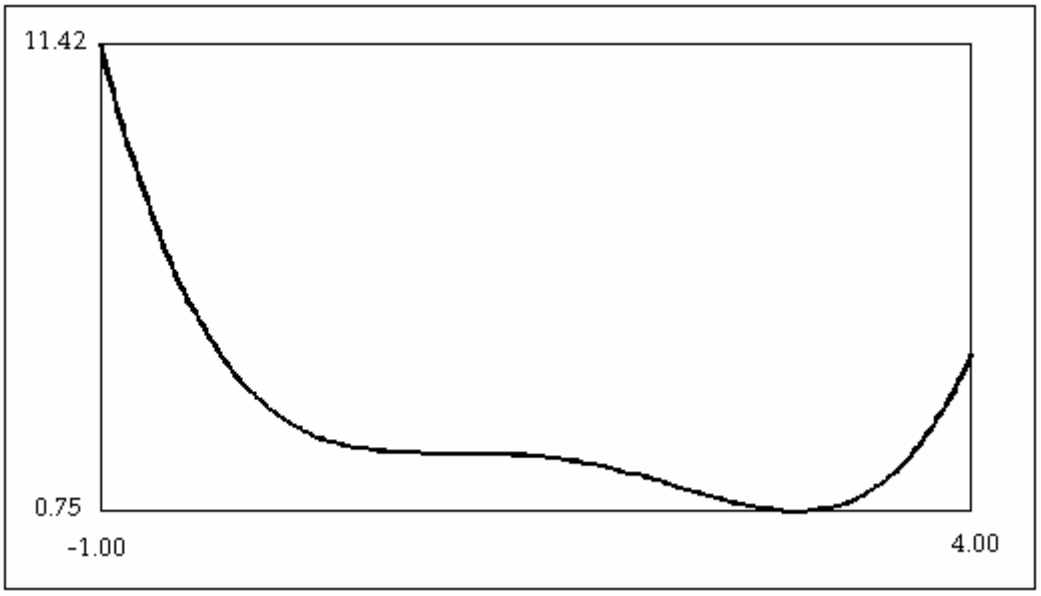


Fig. 1.2. Graficul funcției (1.1).

Generalizare. Pentru o funcție de *n* variabile independente cu $j+1$ derivate continue în jurul punctului *a***,** dezvoltarea în serie Taylor a acesteia va fi

$$f(x) = f(a) + \frac{\Delta f}{1!} + \frac{\Delta^2 f}{2!} + \ldots + \frac{\Delta^j f}{j!} + R_{j+1} \qquad (1.14)$$

unde

$$\Delta f = (x_1 - a_1)\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)\Big|_{x=a} + (x_2 - a_2)\left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)\Big|_{x=a} + \ldots + (x_n - a_n)\left(\frac{\partial f}{\partial x_n}\right)\Big|_{x=a} ; \qquad (1.15)$$

$$\Delta^2 f = (x_1 - a_1)^2\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}\right)\Big|_{X=A} + 2(x_1 - a_1)(x_2 - a_2)\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}\right)\Big|_{X=A} + $$
$$+ (x_2 - a_2)^2\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}\right)\Big|_{X=A} + \ldots + (x_n - a_n)^2\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}\right)\Big|_{X=A} ; \qquad (1.16)$$

$$\Delta^j f = \sum \frac{j!}{p_1! p_2! \ldots p_n!}(x_1 - a_1)^{p_1}(x_2 - a_2)^{p_2} \ldots (x_n - a_n)^{p_n}\left(\frac{\partial^j f}{\partial x_1^{p_1} \partial x_2^{p_2} \ldots \partial x_n^{p_n}}\right)$$
. (1.17)

În mod similar cu cazul unei funcții de o variabilă, se poate demonstra că, respectiv condiția necesară şi suficientă ca *a* să fie un punct staționar constă în anularea valorii tuturor derivatelor parțiale de ordinul întâi în respectivul punct

$$\Delta f = 0 . \qquad (1.18)$$

Tipul de punct staționar (minim, maxim sau inflexiune) poate fi stabilit în urma determinării semnului sumei $\Delta^2 f$. Astfel, dacă $\Delta^2 f < 0$, punctul *a* este un maxim local, iar dacă $\Delta^2 f > 0$, a este un minim local.

1.5. Concavitate - convexitate

Două noțiuni sunt frecvent utilizate în studiul metodelor de optimizare a funcțiilor multivariabile: concavitatea şi convexitatea. Aceste două noțiuni trebuie aplicate atât funcțiilor obiectiv cât şi domeniilor acestor funcții.

1.5.1. Funcții convexe şi concave

O funcție $f(x)$ este considerată *concavă* într-un domeniu $[a,b]$, dacă pentru oricare două puncte din domeniu, x_1şi x_2, este valabilă relația

$$f(\lambda x_1 + (1-\lambda)x_2) > \lambda f(x_1) + (1-\lambda) f(x_2) \qquad (1.19)$$

pentru oricare valoare $0 < \lambda < 1$, figura 1.3.

Ilustrarea grafică a relației (1.19) indică faptul că segmentul de dreaptă $|f(x_1), f(x_2)|$ se găseşte întotdeauna sub funcția $f(x)$.

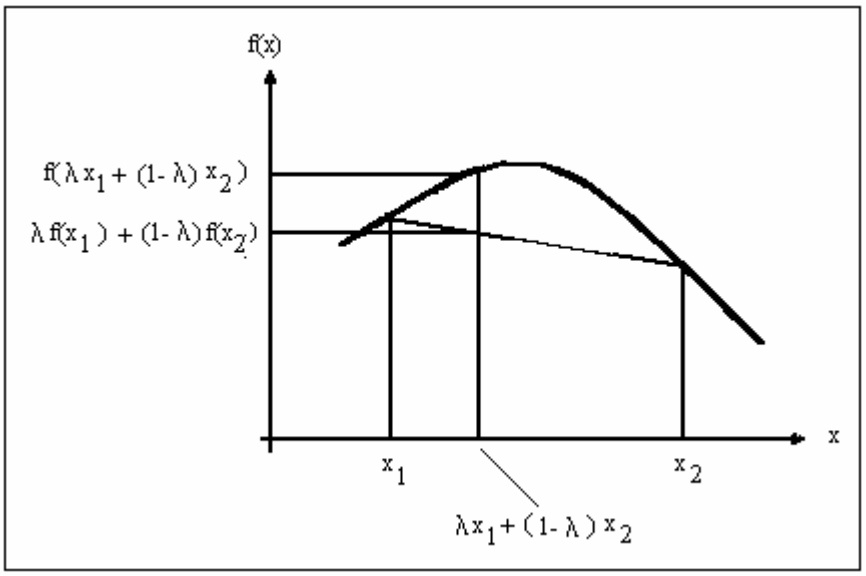


Fig. 1.3. Funcție concavă.

Similar se poate exprima condiția de *convexitate*

$$f(\lambda x_1 + (1-\lambda)x_2) < \lambda f(x_1) + (1-\lambda) f(x_2), \qquad (1.20)$$

segmentul $|f(x_1), f(x_2)|$ fiind plasat întotdeauna deasupra funcției $f(x)$, figura 1.4.

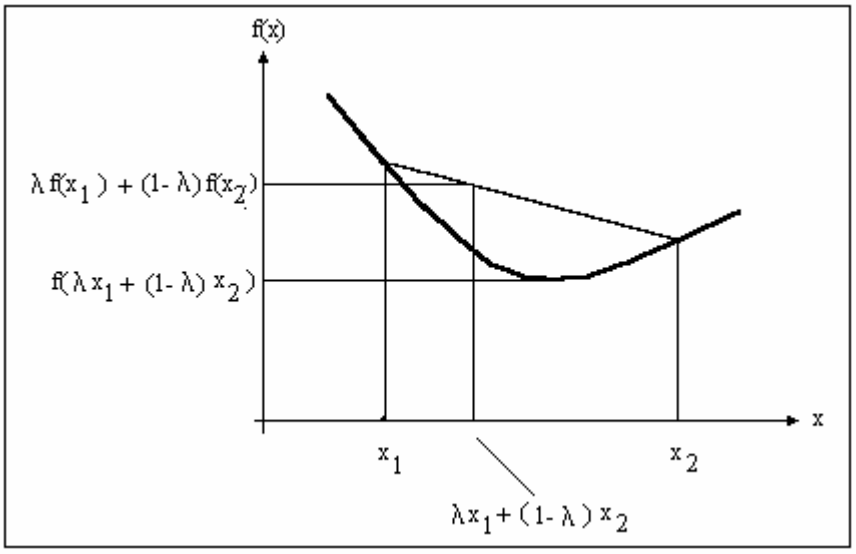


Fig. 1.4. Funcție convexă.

Consecinţe:

1. Într-o problemă de optimizare, pentru funcţiile *concave* se va determina *maximul*, iar pentru funcţiile *convexe*, se va determina *minimu*l funcţiei.
2. Dacă o funcţie $f(x)$ este concavă atunci $-f(x)$ va fi convexă şi invers.
3. O funcţie convexă sau concavă pe un domeniu $[a,b]$, are un singur minim respectiv maxim. În acest caz funcţia $f(x)$ este *unimodală.*

1.5.2. Mulţimi convexe

Fie o funcţie $f(\boldsymbol{X})$ bidimensională. Domeniul de definiţie **S** al funcţiei este un *domeniu convex* dacă, pentru oricare două puncte conţinute, segmentul de linie dreaptă care le uneşte aparţine punct cu punct la domeniul respectiv. Aceasta înseamnă că dacă

$$\boldsymbol{X} = \lambda \boldsymbol{X}^{(1)} + (1-\lambda)\boldsymbol{X}^{(2)} \tag{1.21}$$

oricare ar fi $\boldsymbol{X}^{(1)}$, $\boldsymbol{X}^{(2)}$ şi $0 < \lambda < 1$, trebuie ca $\boldsymbol{X} \in \boldsymbol{S}$. Dacă $\boldsymbol{X}$ astfel definit nu aparţine lui **S**, respectivul domeniu este non-convex. În figura 1.5 sunt prezentate exemple de mulţimi în spaţiul bidimensional. Mulţimile sunt constituite din totalitatea punctelor din interiorul şi de pe graniţa figurilor geometrice reprezentate.

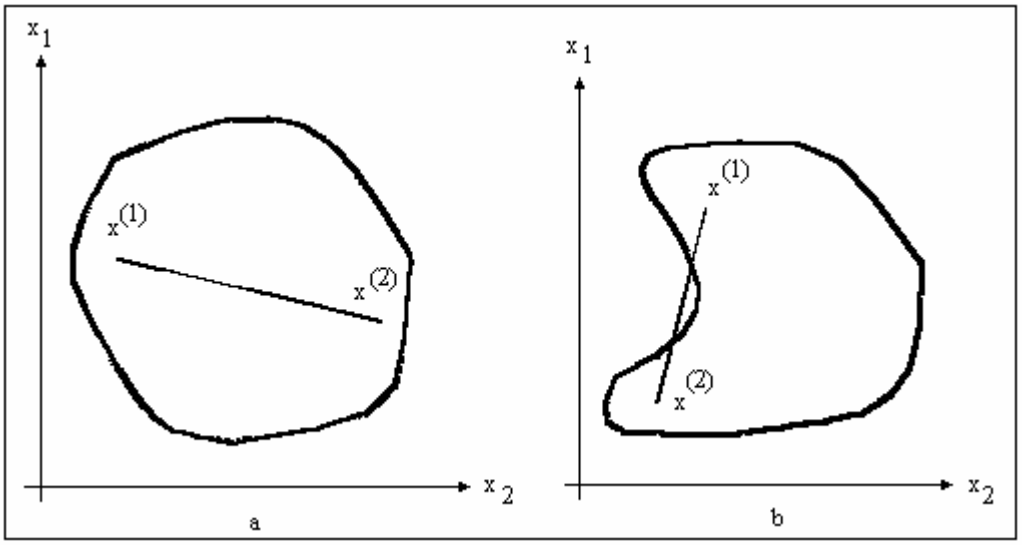


Fig. 1.5. Domenii de definiţie ale funcţiilor multivariabile:
a) domeniu convex; b) domeniu nonconvex.

Consecinţe:

1. Fiecare restricție de tip inegalitate definește o mulțime convexă.
2. Domeniul corespunzător satisfacerii simultane a mai multor restricții de tip inegalitate, reprezentat de intersecția mulțimilor convexe, este dat tot de o mulțime convexă.

2. METODE ANALITICE

Metodele reunite sub numele de *metode analitice* au meritul de a constitui primele modalităţi de soluţionare a problemelor de extrem, având la bază lucrările fundamentale ale calculului diferenţial datorate lui Newton, Leibnitz, Fermat, Lagrange, Euler. În opoziţie cu metodele]n cadrul cărora poziţia optimului este obţinută printr-un şir de iteraţii ce implică o serie de evaluări ale funcţiei obiectiv, metodele analitice clasice sunt metode bazate pe condiţia necesară de existenţă a extremului. Folosirea metodelor analitice impune obligativitatea obţinerii expresiilor analitice ale derivatelor funcţiei obiectiv. Această condiţie primordială îngustează apreciabil domeniul de utilizare a acestor metode.

O aplicaţie importantă a metodei analitice clasice în cazul funcţiilor obiectiv multivariabile o constituie *analiza de regresie***.** Utilizarea analizei de regresie în inginerie urmăreşte prelucrarea datelor experimentale în vederea determinării valorilor parametrilor unor modele matematice bazate pe relaţii de aproximare. Modelele matematice obţinute prin aplicarea analizei de regresie sunt denumite *ecuaţii de regresie***.** Ecuaţiile de regresie obţinute sunt supuse ulterior *analizei statistice* în scopul verificării - semnificaţiei coeficienţilor şi a adecvanţei ecuaţiei de regresie.

2.1. Regresia liniară

Fie un sistem din figura 2.1, caracterizat prin variabila de intrare x şi variabila de ieşire y.

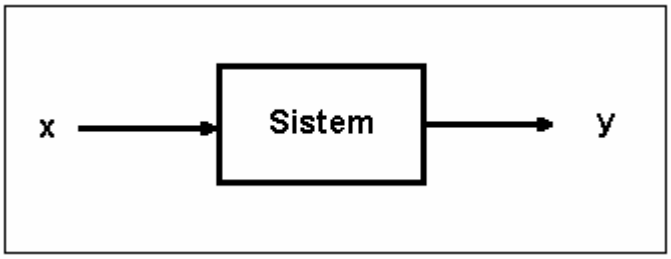


Fig. 2.1. Sistem monovariabil.

Prin ipoteză, se presupune că modelul matematic în regim staționar al sistemului este o dependență liniară

$$y = a_0 + a_1 x . \tag{2.1}$$

Experimental sunt determinate m seturi de date $(x_i, y_i), i = 1,\ldots,m$. În scopul determinării coeficienților modelului (2.1) se construiește funcția obiectiv

$$f_{ob}(a_0, a_1) = \sum_{j=1}^{m} \left[y_j - (a_o + a_1 x_j) \right]^2 . \tag{2.2}$$

Determinarea coeficienților a_0 şi a_1 prin minimizarea funcției obiectiv (2.2) este cunoscut sub numele de *metoda celor mai mici pătrate*. Aplicând condiția necesară de existență a unui extrem pentru funcții obiectiv multivariabile, se obține sistemul de ecuații

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f_{ob}}{\partial a_0} = 0 \\ \dfrac{\partial f_{ob}}{\partial a_1} = 0 \end{cases} . \tag{2.3}$$

Deoarece prin structura funcției obiectiv, sistemul (2.3) este liniar în raport cu variabilele a_0 şi a_1, dezvoltând expresiile derivatelor se obține succesiv

$$\begin{cases} -2\sum_{j=1}^{m} \left[y_j - a_0 - a_1 x_j \right] = 0 \\ -2\sum_{j=1}^{m} x_j \left[y_j - a_0 - a_1 x_j \right] = 0 \end{cases} ,$$

respectiv

$$\begin{cases} a_0 m + a_1 \sum_{j=1}^{m} x_j = \sum_{j=1}^{m} y_j \\ a_0 \sum_{j=1}^{m} x_j + a_1 \sum_{j=1}^{m} x_j^2 = \sum_{j=1}^{m} x_j y_j \end{cases} . \tag{2.4}$$

În formă vectorială, sistemul (2.4) devine $\mathbf{X}\,\mathbf{A} = \mathbf{Y}$, în care:

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} m & \sum_{j=1}^{m} x_j \\ \sum_{j=1}^{m} x_j & \sum_{j=1}^{m} x_j^2 \end{bmatrix}; \quad \boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}; \quad \boldsymbol{Y} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{m} y_j \\ \sum_{j=1}^{m} x_j y_j \end{bmatrix}.$$

Soluția sistemului (2.4) este disponibilă pe cale numerică, prin utilizarea algoritmului Gauss.

Soluția analitică a sistemului (2.4) este

$$\begin{cases} \hat{a}_0 = \dfrac{\sum_{j=1}^{m} y_j \sum_{j=1}^{m} x_j^2 - \sum_{j=1}^{m} x_j \sum_{j=1}^{m} x_j y_j}{m \sum_{j=1}^{m} x_j^2 - \left(\sum_{j=1}^{m} x_j \right)^2} \\ \hat{a}_1 = \dfrac{m \sum_{j=1}^{m} x_j y_j - \sum_{j=1}^{m} x_j \sum_{j=1}^{m} y_j}{m \sum_{j=1}^{m} x_j^2 - \left(\sum_{j=1}^{m} x_j \right)^2} \end{cases} . \tag{2.5}$$

2.2. Analiza statistică

Calitatea ecuației de regresie se stabileşte cu ajutorul analizei statistice. Semnificația coeficienților ecuației de regresie se realizează cu ajutorul testului Student [35]. În acest scop, pentru observații repetate, se calculează aproximata s_0^2 a dispersiilor valorilor y_j

$$s_0^2 = \frac{1}{m_0 - 1} \sum_{k=1}^{m_0} \left(y_{0,k} - \overline{y_0} \right)^2 \tag{2.6}$$

unde $y_{0,k}$ este observația repetată de m_0 ori şi $\overline{y_0}$ - media observațiilor repetate

$$\overline{y_0} = \frac{1}{m_0} \sum_{k=1}^{m_0} y_{0,\mathrm{k}} . \tag{2.7}$$

Dispersiile coeficienților $\hat{a}_0$ şi $\hat{a}_1$ se calculează cu relațiile:

$$s_{a,0}^2 = \frac{s_0^2 \sum_{j=1}^{m} x_{\mathrm{j}}^2}{m \sum_{j=1}^{m} \left(x_{\mathrm{j}} - \overline{x} \right)^2} ; \tag{2.8}$$

$$s_{a,1}^2 = \frac{s_0^2}{\sum_{j=1}^{m} \left(x_{\mathrm{j}} - \overline{x} \right)^2} . \tag{2.9}$$

Se calculează *criteriul Student*

$$t_{\mathrm{i}} = \frac{|a_{\mathrm{i}}|}{s_{a,\mathrm{i}}}, \tag{2.10}$$

unde a_{i} este coeficientul i al ecuației de regresie.

Dacă

$$t_{\mathrm{i}} \rangle t_{\mathrm{p}}; \quad \upsilon_0 = m_0 - 1; \quad \alpha = 0{,}05 \tag{2.11}$$

coeficientul a_{i} se consideră semnificativ.

Semnificația adecvanței ecuației de regresie implică parcurgerea următoarelor etape:

- calculul dispersiei adecvanței

$$s^2 = \frac{\sum_{j=1}^{m}\left[y_{\mathrm{j}} - \left(\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_j\right)\right]^2}{m-2}; \tag{2.12}$$

- calculul adecvanței, pe baza criteriului Fisher

$$F = s^2 / s_0^2 . \tag{2.13}$$

Dacă este îndeplinit setul de condiții

$$\begin{cases} F < F_{\mathrm{p}} \\ v = m - 2 \\ \alpha = 0{,}005 \end{cases}, \tag{2.14}$$

atunci ecuația de regresie este adecvată.

<u>*Observație.*</u> Pentru experimentele în care nu există observații repetate, se calculează numai dispersia adecvanței modelului, adică împrăştierea punctelor experimentale în jurul dreptei de regresie.

Utilizând relația (2.1) se obține o estimare a punctului experimental

$$y_i^{calc} = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_i .$$

Considerând o repartiție normală sau repartiție Gauss a punctelor y_j în raport cu y_i^{calc} şi abaterea standard exprimată prin

$$\sigma = \sqrt{s^2}, \tag{2.15}$$

pot exista următoarele situații prezentate în tabelul 2.1.

Tabelul 2.1

Intervalele de localizare şi pragurile de încredere

Nr. crt.	Ponderea punctelor experimentale [%]	Intervalul de încredere a punctelor experimentale
1	68,26	$\left(y_j^{calc} - \sigma, y_j^{calc} + \sigma\right)$
2	95,44	$\left(y_j^{calc} - 2\sigma, y_j^{calc} + 2\sigma\right)$
3	99,74	$\left(y_j^{calc} - 3\sigma, y_j^{calc} + 3\sigma\right)$

O imagine a repartiţiei Gauss a punctelor experimentale în jurul dreptei de regresie şi pragurile de încredere este prezentată în figura 2.2.

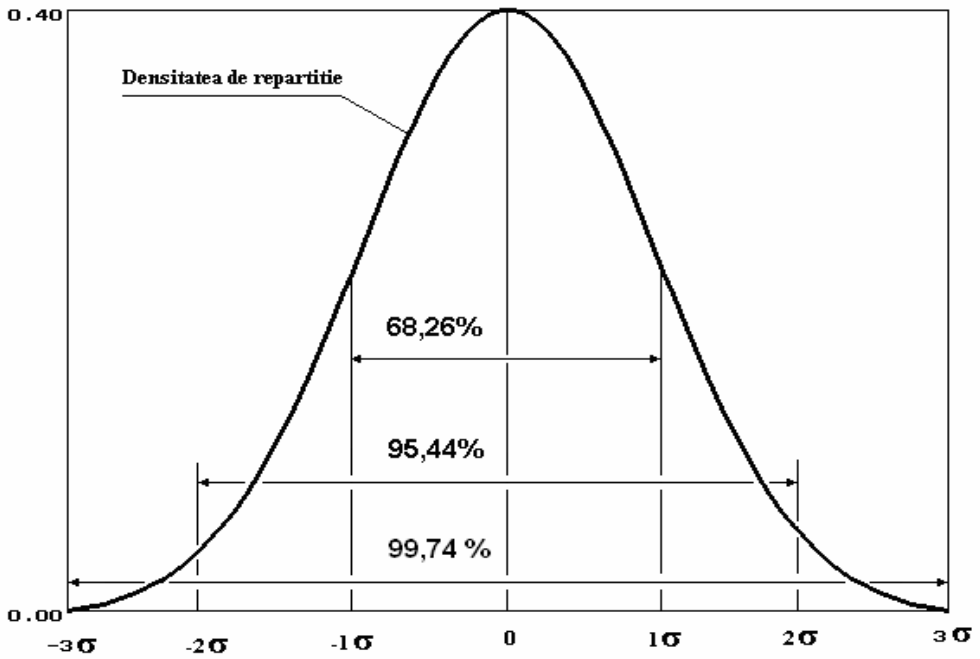


Fig. 2.2. Repartiţia normală şi pragurile de încredere.

Abaterea standard este exprimată în unităţi de măsură ale mărimii de ieşire şi în consecinţă valoarea abaterii standard este un indicator al calităţii ecuaţiei de regresie**.** O prezentare sugestivă este ilustrată în figura 2.3.

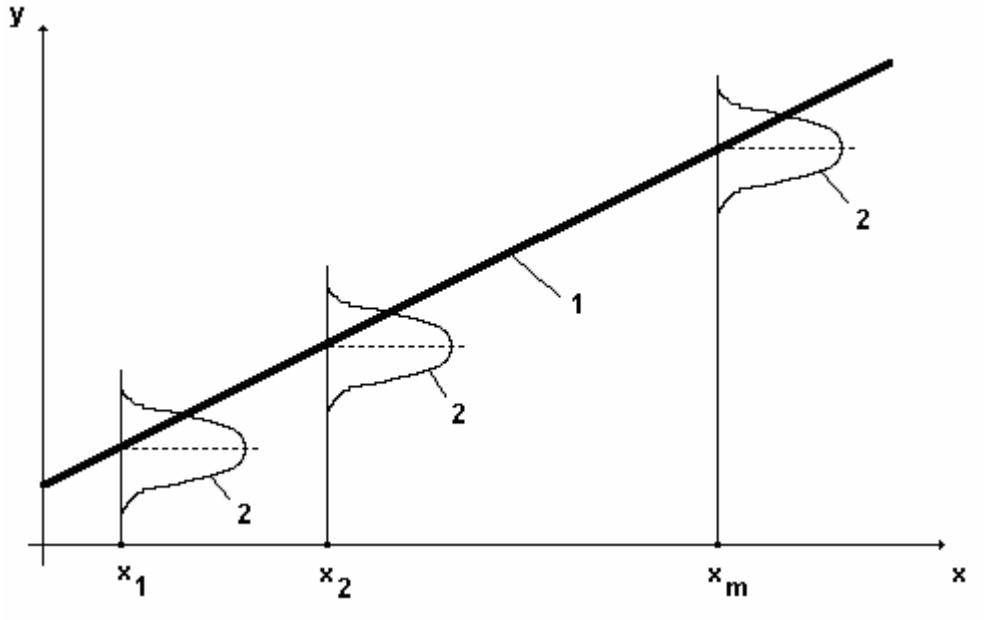


Fig. 2.3. Regresia liniară: 1- dreapta de regresie;
2 - repartiții ale lui y_j în jurul dreptei de regresie.

Adecvanța modelului matematic, determinat pe cale statistică, este verificată în modul următor:

a) se impune un anumit nivel de încredere acordat modelului matematic al sistemului (de exemplu 95,44%);
b) o valoare mică a abaterii standard, comparativ cu valorile y_j, indică o adecvanță foarte bună a ecuației de regresie.

Problemă. Pentru un termocuplu fier-constantan, în urma unor observații experimentale au rezultat perechile de valori $(x_i, y_i), i = 1,\ldots,m$, prezentate în tabelul 2.2. Se cere să se determine modelul matematic al termocuplului, în vederea utilizării ulterioare în cadrul unui sistem de măsurare numerică a temperaturii.

Rezolvare. Se dezvoltă sistemul (2.4), cu soluția analitică (2.5). Rezolvarea acestuia conduce la rezultatele numerice prezentate în tabelul 2.3. Coeficientul de transfer al termocuplului este dat de coeficientul a_1 din modelul 2.1. Abaterea standard, 0,04 mV, este deosebit de redusă, acoperind, în medie, un domeniu de 95 % din datele măsurate. Exceptând primele puncte, abaterea relativă este de circa 5 % în raport cu datele experimentale. Imaginea datelor experimentale precum şi a dependenței căutate este prezentată în figura 2.4.

Tabelul 2.2

Date experimentale pentru termocuplul fier-constantan

Temperatură	Tensiune	Temperatură	Tensiune

[°C]	[mV]	[°C]	[mV]
24	0,11	40	1,06
26	0,22	41	1,10
28	0,38	44	1,24
29	0,46	48	1,48
32	0,58	50	1,56
33	0,69	53	1,79
35	0,80	58	2,02
36	0,82	62	2,12

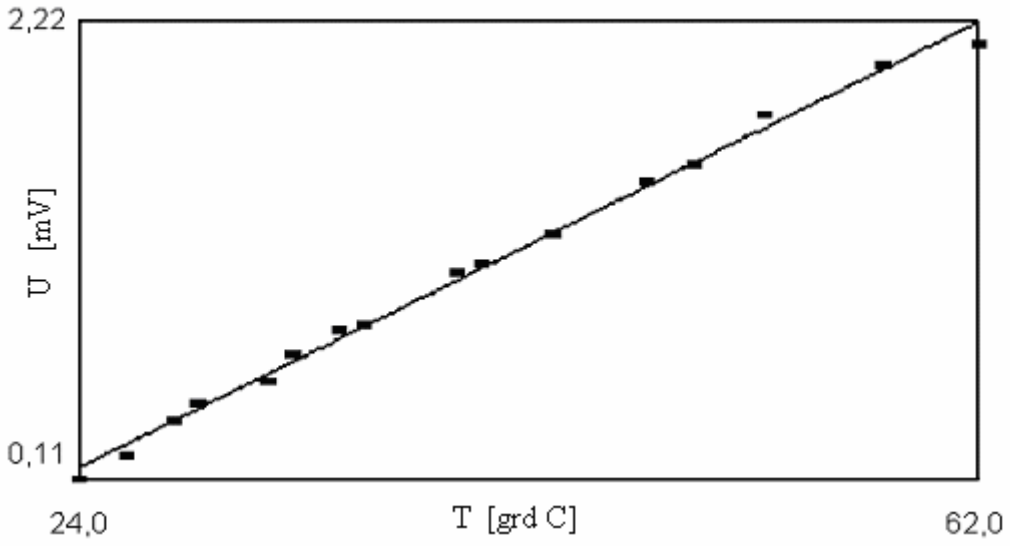


Fig. 2.4. Reprezentarea grafică a datelor experimentale şi a modelului (2.1).

Tabelul 2.3

Rezultatele numerice obţinute pentru datele din tabelul 2.2

Parametrul statistic	Valoare
a_0	-1.1302273357E+00
a_1	5.4011952068E-02
$\sqrt{\sigma^2}$	4.0778025263E-02
$\max \left\lvert \frac{y_i - y_i^{calc}}{y_i} \right\rvert$	5.19 %

Utilizând rezultatele din tabelul 2.3, modelul matematic al termocuplului devine

$$U = -1{,}1302273357 + 5{,}4011952068 * 10^{-2}\ \Delta T, \quad [\text{mV}] \quad (2.16)$$

Pentru a realiza un sistem de măsurare numerică a temperaturii, din (2.16) se determină dependenţa $\Delta T = f(U)$, respectiv

$$\Delta T = 0{,}1851442063 * 10^2 - 0{,}209255043 * 10^2\ U\ . \quad [°C]. \qquad (2.17)$$

2.3. Regresia polinomială

Se consideră un sistem neliniar, monovariabil, al cărui model matematic în regim staționar este descris de ecuația

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n\ , \qquad (2.18)$$

respectiv

$$y = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i\ . \qquad (2.19)$$

Datele experimentale pentru sistemul descris anterior sunt de forma $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, m$. Se cere să se determine cel mai bun grad al funcției (2.18) şi valorile coeficienților $a_i, i = 0, \ldots, n$.

2.3.1. Rezolvarea problemei de regresie polinomială

Se consideră funcția obiectiv

$$f_{ob}(A) = \sum_{j=1}^{m} \left[y_j - \sum_{i=0}^{n} a_i x_j^i \right]^2 . \qquad (2.20)$$

Determinarea coeficienților $a_i, i = 0, \ldots, n$ este realizată prin minimizarea funcției obiectiv (2.20), respectiv *metoda celor mai mici pătrate*. Aplicând condiția necesară de existență a unui extrem pentru funcții obiectiv multivariabile, se obține sistemul de ecuații

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f_{\text{ob}}}{\partial a_0} = 0 \\ \dfrac{\partial f_{\text{ob}}}{\partial a_1} = 0 \\ \vdots \\ \dfrac{\partial f_{\text{ob}}}{\partial a_{\text{n}}} = 0 \end{cases},$$

respectiv

$$\sum_{j=1}^{m} x_j^i * \left[y_j - \sum_{i=0}^{n} a_i x_j^i \right] = 0, \quad i = 0,...n \tag{2.21}$$

În aceste condiții, sistemul (2.21) devine în forma explicită

$$\begin{cases} m a_0 + a_1 \sum_{j=1}^{m} x_j + a_2 \sum_{j=1}^{m} x_j^2 + \dots + a_n \sum_{j=1}^{m} x_j^n = \sum_{j=1}^{m} y_j \\ a_0 \sum_{j=1}^{m} x_j + a_1 \sum_{j=1}^{m} x_j^2 + a_2 \sum_{j=1}^{m} x_j^3 + \dots + a_n \sum_{j=1}^{m} x_j^{n+1} = \sum_{j=1}^{m} y_j x_j \\ a_0 \sum_{j=1}^{m} x_j^2 + a_1 \sum_{j=1}^{m} x_j^3 + a_2 \sum_{j=1}^{m} x_j^4 + \dots + a_n \sum_{j=1}^{m} x_j^{n+2} = \sum_{j=1}^{m} y_j x_j^2 \\ \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \\ a_0 \sum_{j=1}^{m} x_j^n + a_1 \sum_{j=1}^{m} x_j^{n+1} + a_2 \sum_{j=1}^{m} x_j^{n+2} + \dots + a_n \sum_{j=1}^{m} x_j^{2n} = \sum_{j=1}^{m} y_j x_j^n \end{cases}. \tag{2.22}$$

Forma matriceală a sistemului este $\boldsymbol{XA} = \boldsymbol{Y}$, în care matricea $\boldsymbol{X}$ are forma

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} m & \sum_{j=1}^{m} x_j & \sum_{j=1}^{m} x_j^2 & \dots & \sum_{j=1}^{m} x_j^{\text{n}} \\ \sum_{j=1}^{m} x_j & \sum_{j=1}^{m} x_j^2 & \sum_{j=1}^{m} x_j^3 & \dots & \sum_{j=1}^{m} x_{\text{j}}^{n+1} \\ \sum_{j=1}^{m} x_j^2 & \sum_{j=1}^{m} x_j^3 & \sum_{j=1}^{m} x_j^4 & \dots & \sum_{j=1}^{m} x_j^{n+2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{j=1}^{m} x_j^n & \sum_{j=1}^{m} x_j^{n+1} & \sum_{j=1}^{m} x_j^{n+2} & \dots & \sum_{j=1}^{m} x_j^{2n} \end{bmatrix}; \tag{2.23}$$

iar

$$\boldsymbol{A}^T = [a_0, a_1, a_2, \dots, a_n,], \tag{2.24}$$

$$\boldsymbol{Y}^T = \left[\sum_{j=1}^{m} y_j \quad \sum_{j=1}^{m} y_j x_j^1 \quad \sum_{j=1}^{m} y_j x_j^2 \quad \dots \quad \sum_{j=1}^{m} y_j x_j^{2n} \right]. \tag{2.25}$$

Sistemul (2.22) este liniar, soluția fiind accesibilă prin intermediul tehnicilor numerice.

2.3.2. Studiu de caz. Caracteristica statică a traductorului de debit.

Se consideră un traductor de debit cu diafragmă. Datele experimentale privind dependența dintre mărimea de ieşire, curentul generat de traductor, şi mărimea de intrare, debitul volumic, sunt prezentate în tabelul 2.4. Se cere să se determine cea mai bună dependență de forma (2.18), în care gradul *n* variază între 1 şi *nmax*, şi valorile coeficienților $a_i, i = 0,\dots,n$.

Tabelul 2.4

Date experimentale pentru traductorul de debit

Nr. crt.	Debit [m^3/h]	Curent [mA]	Nr. crt.	Debit [m^3/h]	Curent [mA]
1	10,14	10,00	5	4,34	3,40
2	8,64	8,00	6	1,86	2,40
3	8,18	7,20	7	1,44	2,20
4	7,20	6,00	8	0,00	2,00

<u>*Rezolvare*</u>. Algoritmul regresiei polinomiale cuprinde următoarele etape:

- **Pasul 1**. Calculul sumelor în x_j şi y_j

$$Sx_1 = m; \tag{2.26}$$

$$Sx_i = \sum_{j=1}^{m} x_j^{i-1}, i = 2,\dots,2n_{max}+1; \tag{2.27}$$

$$Sxy_1 = \sum_{j=1}^{m} y_j; \tag{2.28}$$

$$Sxy_i = \sum_{j=1}^{m} y_j x_j^{i-1}, i = 2,\dots,n_{max}+1. \tag{2.29}$$

- **Pasul 2**. Inițializarea gradului polinomului de regresie

$n = 1$;

- **Pasul 3**. Generarea matricei sistemului de ecuații, a termenului liber şi rezolvarea sistemului de ecuații liniare

$$c_{ij} = Sx_{i+j-1},\ i = 1,\ldots,n+1,\ j = 1,\ldots,n+1; \qquad (2.30)$$

$$b_i = Sxy_i,\ i = 1,\ldots,n+1. \qquad (2.31)$$

$$\boldsymbol{CA} = \boldsymbol{B}. \qquad (2.32)$$

$$w_{n,i} = a_i,\ i = 1,\ldots,n+1.$$

- **Pasul 4**. Calculul dispersiei şi a abaterii standard

$$s^2 = \sum_{j=1}^{m}\left[y_j - \left(a_0 + a_1x_j^1 + a_2x_j^2 + \ldots + a_nx_j^n\right)\right]^2; \qquad (2.33)$$

$$\sigma = \sqrt{s^2}; \qquad (2.34)$$

$$disp_n = s^2.$$

- **Pasul 5**. Testul gradului polinomului de regresie

$$n < n_{max} \quad \begin{cases} da & \begin{cases} n = n+1 \\ Salt\ la\ Pasul\ 3 \end{cases} \\ nu & Salt\ la\ Pasul\ 6 \end{cases}$$

- **Pasul 6**. Determinarea gradului optim al polinomului de regresie

$$grad = i, \quad \Big| \min_i\left(grad_i,\ i = 1,\ldots,n_{max}\right).$$

Pornind de la algoritmul descris anterior, a fost realizat un sistem de programe pentru regresia polinomială şi analiza statistică, denumit **SRegPol.** Sistemul de programe **SRegPol** este scris sub mediul DELPHI şi este un program interactiv. La lansarea programului se obține imaginea din figura 2.5.

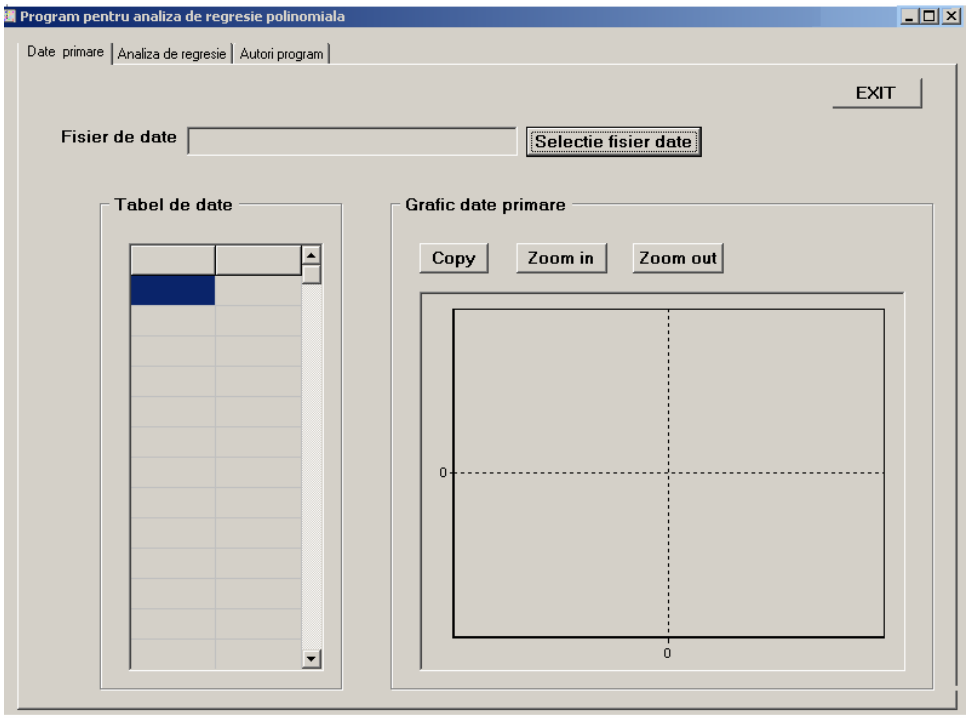


Fig. 2.5. Meniul principal asociat programului pentru analiza de regresie.

Conţinutul sistemului de programe este următorul: **SRegPol.exe** – fişier executabil ce conţine sistemul de programe pentru regresia polinomială şi analiza statistică; **fis_reg1.dat** - fişier de date conţinând datele primare din fişierul implicit de date; **reg1_dat.dat** - fişier de date de ieşire conţinând coeficienţii şi abaterea standard a ecuaţiei de regresie; **reg2_dat.dat** - fişier de date de ieşire conţinând datele primare, valorile calculate ale variabilei dependente precum şi abaterile variabilei dependente, calculate în raport cu valorile primare.

Sistemul de programe are următoarele meniuri de comenzi:

Date primare - selectarea fişierului şi vizualizarea datelor primare;

Analiza de regresie - execuţia programului de regresie polinomială, interpretarea grafică şi analiza statistică a rezultatelor;

Exit - abandonarea programului pentru analiză de regresie.

În figura 2.6 este prezentat rezultatul executării funcţiei *Date primare*. Sunt vizualizate atât datele primare cât şi reprezentarea grafică a acestora.

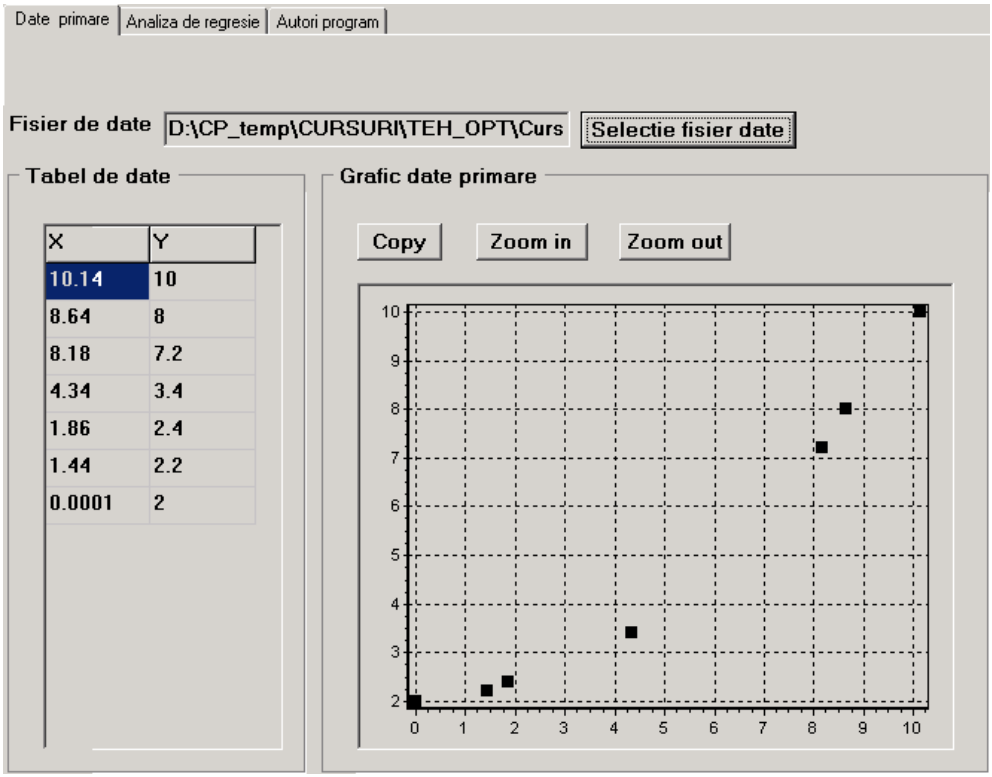


Fig. 2.6. Funcția *Date primare*.

Funcția Analiza de regresie este vizualizată în figura 2.7. În acest exemplu, gradul polinomului de regresie este 2. Sunt afişate următoarele rezultate:

abaterea standard,

coeficienții polinomului de regresie,

datele primare (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, m$,

datele calculate $\left(y_i^{calc}, \dfrac{y_i - y_i^{calc}}{y_i} \times 100 \right)$, $i = 1, \ldots, m$.

În tabelul 2.5 sunt prezentate rezultatele comparative obținute în urma rulării programului **SRegPol**. Gradul optim al funcției este determinat prin utilizarea următoarelor criterii:

a) valoarea abaterii standard;
b) sensul fizic al ecuației de regresie.

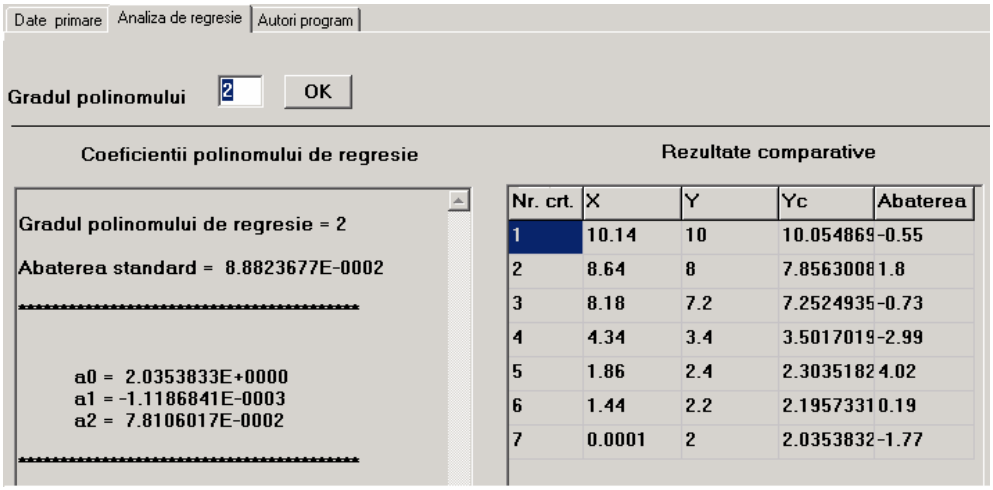


Fig. 2.7. Funcția *Analiză de regresie*.

Tabelul 2.5

Rezultate comparative ale problemei formulate în tabelul 2.4

Gradul	Abaterea standard	Observații
1	0,711068	Abatere standard mare Nu corespunde realității fizice
2	0,088823	Abatere standard mică Corespunde realității fizice
3	0,088658	Abatere standard mică Nu corespunde realității fizice
4	0,060182	Abatere standard mică Nu corespunde realității fizice

Din analiza rezultatelor prezentate în tabelul 2.5, valoarea optimă a gradului funcției (2.18) este 2. În aceste condiții, coeficienții $a_i, i = 0,\ldots,2$ au valorile ilustrate în tabelul 2.6.

Tabelul 2.6

Rezultate numerice obținute în exemplul din tabelul 2.4

Parametrul statistic	Valoare numerică
a_0	2.0353833301E+00
a_1	-1.1186842946E-03
a_2	7.8106016873E-02
$\sqrt{\sigma^2}$	8.8823677407E-02
$max\left\lvert\frac{y_i - y_i^{calc}}{y_i}\right\rvert\ \%$	-2.99

O imagine sugestivă a datelor experimentale precum şi a funcției determinate este prezentată în figura 2.8.

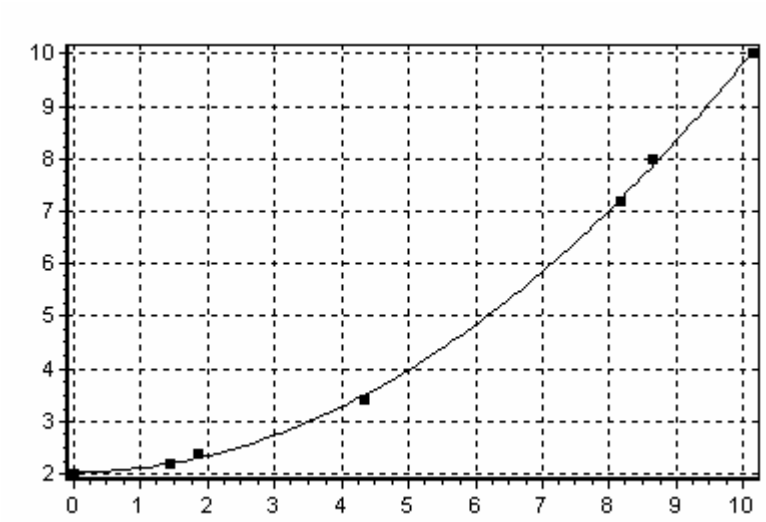


Fig. 2.8. Reprezentarea grafică a datelor experimentale şi a ecuației de regresie.

2.4. Regresia multiplă liniară

Se consideră un sistem caracterizat prin n variabile de intrare $x_i, i = 1,\ldots,n$ şi o variabila de ieşire y, figura. 2.9.

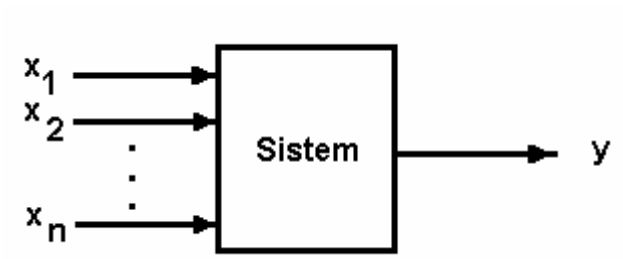


Figura 2.9. Sistem cu n intrări şi o ieşire.

Rezultatele experimentale pentru asemenea sisteme sunt de forma $(x_{ij}, i = 1,\ldots,n,\ y_j),\ j = 1,\ldots m$. În regim staționar, sistemul poate fi descris prin modelul

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \ldots + a_n x_n . \qquad (2.35)$$

Se cere să se determine coeficienții $a_i, i = 0,\ldots,n$ ai modelului matematic (2.26).

2.4.1. Principii teoretice

Pentru determinarea parametrilor modelului (2.35) se construieşte funcţia obiectiv

$$f_{ob}(a_0, a_1, a_2, \cdots, a_n) = \sum_{j=1}^{m}\left[y_j - \left(\sum_{i=0}^{n} a_i x_{i,j}\right)\right]^2 . \qquad (2.36)$$

Aplicând condiţia necesară pentru determinarea minimului funcţiei (2.36) se obţine

$$\left\{\frac{\partial f_{ob}}{\partial a_i} = 0, \quad i = 1, \ldots, n . \right. \qquad (2.37)$$

Dezvoltând (2.37) se obţine sistemul

$$\begin{cases} m a_0 & + a_1 \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} & + a_2 \sum_{j=1}^{m} x_{2,j} & + \ldots & a_n \sum_{j=1}^{m} x_{n,j} & = \sum_{j=1}^{m} y_j \\ a_0 \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} & + a_1 \sum_{j=1}^{m} x_{1,j}^2 & + a_2 \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} x_{2,j} & + \ldots & a_n \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} x_{n,j} & = \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} y_j \\ a_0 \sum_{j=1}^{m} x_{2,j} & + a_1 \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} x_{2,j} & + a_2 \sum_{j=1}^{m} x_{2,j}^2 & + \ldots & a_n \sum_{j=1}^{m} x_{2,j} x_{n,j} & = \sum_{j=1}^{m} x_{2,j} y_j \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ a_0 \sum_{j=1}^{m} x_{n,j} & + a_1 \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} x_{n,j} & + a_2 \sum_{j=1}^{m} x_{2,j} x_{n,j} & + \ldots & a_n \sum_{j=1}^{m} x_{n,j}{}^2 & = \sum_{j=1}^{m} x_{n,j} y_j \end{cases}$$

.

(2.38)

În forma matriceală, sistemul (2.38) devine $\boldsymbol{XA} = \boldsymbol{Y}$, în care

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} m & \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} & \sum_{j=1}^{m} x_{2,j} & \cdots & \sum_{j=1}^{m} x_{n,j} \\ \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} & \sum_{j=1}^{m} x_{1,j}{}^2 & \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} x_{2,j} & \cdots & \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} x_{n,j} \\ \sum_{j=1}^{m} x_{2,j} & \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} x_{2,j} & \sum_{j=1}^{m} x_{2,j}{}^2 & \cdots & \sum_{j=1}^{m} x_{2,j} x_{n,j} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_{j=1}^{m} x_{n,j} & \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} x_{n,j} & \sum_{j=1}^{m} x_{2,j} x_{n,j} & \cdots & \sum_{j=1}^{m} x_{n,j}{}^2 \end{bmatrix}; \qquad (2.39)$$

$$\boldsymbol{A}^T = \left[a_{0,}\ a_{1,}\ a_{2,} \ldots, a_n\right]; \qquad (2.40)$$

$$\boldsymbol{Y}^T = \left[\sum_{j=1}^{m} y_j, \quad \sum_{j=1}^{m} x_{1,j} y_j, \quad \sum_{j=1}^{m} x_{2,j} y_j, \quad \cdots, \quad \sum_{j=1}^{m} x_{n,j} y_j \right]. \qquad (2.41)$$

2.4.2. Aplicație. Determinarea modelului matematic staționar al procesului de stabilizare a benzinei

Procesul de stabilizare a benzinei este un proces fizic de distilare, caracterizat printr-un grad ridicat de complexitate. O schemă bloc a procesului de stabilizare este prezentată în figura 2.10. În tabelul 2.7 sunt prezentate datele experimentale asociate funcționării în regim staționar a coloanei de stabilizare a benzinei

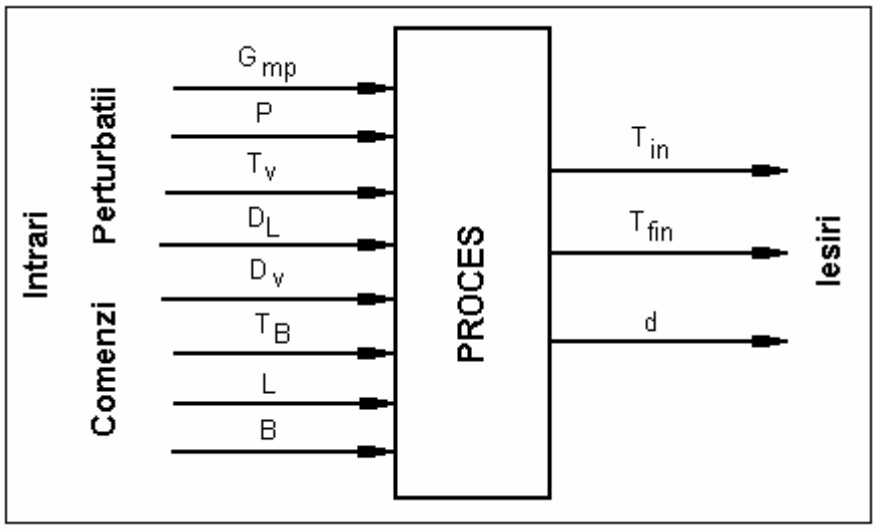


Fig. 2.10. Schema bloc a procesului de stabilizare a benzinei.

Se cere să se determine cel mai bun model matematic liniar al procesului, selectând ca variabila de ieşire temperatura finală a benzinei (indexul 10, tabelul 2.7) şi cel puțin două mărimi de intrare, din cadrul următoarelor variabile:

1. Debit alimentare, G_{mp};
2. Temperatura vârf, T^V;
3. Temperatura bază, T^B;
4. Presiune vârf, P;
5. Debit reflux, L;
6. Debit fracție la FG, D_L;
7. Debit benzină stabilizată, B;
8. Debit gaze necondensabile, D^V.

Tabelul 2.7

Date de operate asociate coloanei de stabilizare a benzinei

Nr. crt.	Debit alim. (m^3/h)	Temp. vârf (°C)	Temp. bază (°C)	Presiune vârf (bar)	Debit reflux (m^3/h)	Debit fracție la FG (m^3/h)	Debit benzină stab. (m^3/h)	Debit gaze necond. (Nm^3/h)	Densitate benzină (kg/m^3)	Temp. inițiță benzină (°C)	Temp. finaă benzină (°C)
Index	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	36	71	153	4,9	22	6	40	540	730	60	190
2	12	71	153	4,9	22	6	40	720	720	58	166
3	40	71	157	4,5	42	10	50	1000	725	62	170
4	36	72	152	4,5	26	9	45	850	729	62	184
5	40	64	150	5,0	50	9	50	1000	742	67	163
6	60	69	150	5,0	54	12	44	500	715	63	166
7	54	74	155	4,6	26	13	64	200	738	61	151
8	50	70	154	4,4	40	13	54	520	716	45	162
9	60	66	154	5,2	10	7	52	550	739	50	176
10	64	65	145	5,0	28	13	40	450	710	52	147

<u>*Rezolvare*</u>. Modelul matematic al procesului de stabilizare a benzinei reprezintă o problemă de regresie multiplă liniară. Algoritmul regresiei multiple liniare cuprinde următoarele etape:

- **Pasul 1**. Calculul sumelor în *x* şi *xy*

$$Sx_i = \sum_{j=1}^{m} x_{ij}, \quad i = 1,\ldots n; \tag{2.42}$$

$$i = 0;$$

$$\begin{cases} i = i + 1 \\ Sxx_i = \sum_{j=1}^{m} x_{kj} * x_{lj}, \quad k = 1,\ldots,n, \quad l = k,\ldots,n; \end{cases} \tag{2.43}$$

$$Sxy_1 = \sum_{j=1}^{m} y_j; \tag{2.44}$$

$$Sxy_i = \sum_{j=1}^{m} x_{ij} * y_j, \quad i = 2,\ldots n+1. \tag{2.45}$$

- **Pasul 2**. Generarea matricei sistemului de ecuaţii, a termenului liber şi rezolvarea sistemului de ecuaţii liniare

$$c_{11} = m; \tag{2.46}$$

$$c_{1,j} = Sx_{j-1}, \quad j = 2,\ldots,n+1; \tag{2.47}$$

$$c_{i,1} = Sx_{i-1}, \quad i = 2,\ldots,n+1; \tag{2.48}$$

$$l = 0;$$

$$\begin{cases} l = l + 1 \\ c_{ij} = Sxx_l, \quad i = 2,\ldots,n+1, \quad j = i,\ldots,n+1; \\ c_{ji} = c_{ij} \end{cases} \tag{2.49}$$

$$b_i = Sxy_i, \quad i = 1,\ldots,n+1; \tag{2.50}$$

$$\boldsymbol{CA} = \boldsymbol{B}. \tag{2.51}$$

- **Pasul 3**. Calculul dispersiei şi a abaterii standard.

$$s^2 = \sum_{j=1}^{m} \left[y_j - \left(a_0 + a_1 x_{1j} + a_2 x_{2j} + \ldots + a_n x_{nj} \right) \right]^2; \tag{2.52}$$

$$\sigma = \sqrt{s^2}. \tag{2.53}$$

Pe baza algoritmului descris anterior, a fost creat un sistem de programe pentru regresia multiplă liniară, denumit **SregMul**. Sistemul de

programe este scris sub mediul DELPHI si este un program interactiv. La lansarea programului se obține imaginea din figura 2.11.

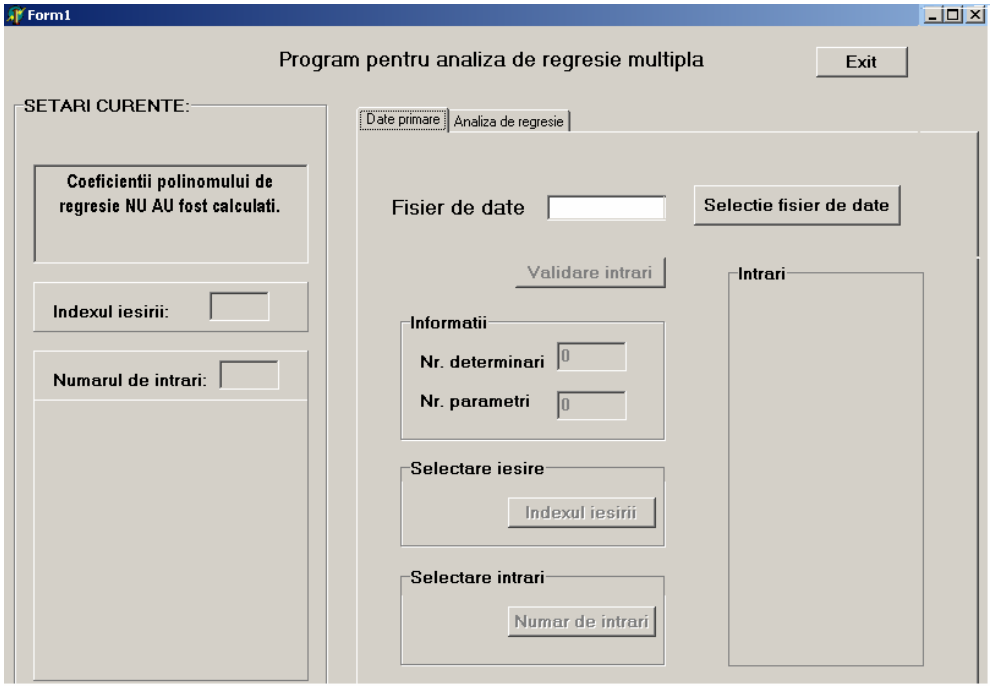


Fig. 2.11. Meniul principal asociat programului pentru analiza de regresie multiplă liniară.

Conținutul sistemului de programe este următorul: **SRegMul.exe** – fişier executabil ce conține sistemul de programe pentru regresia multiplă liniară şi analiza statistică; **fregmul1.dat** - fişier de date de ieşire conținând coeficienții şi abaterea standard a ecuației de regresie; **fregmul2.dat** - fişier de date de ieşire conținând datele primare, valorile calculate ale variabilei dependente precum şi abaterile variabilei dependente, calculate în raport cu valorile primare.

Sistemul de programe **SRegMul** are următoarele meniuri de comenzi:

Date primare - selectarea fişierului de date primare, selecția indexului ieşirii, a numărului de intrări şi a indexurilor acestora;

Analiza de regresie - execuția programului de regresie multiplă liniară şi analiza statistică a rezultatelor;

Exit - abandonarea programului pentru regresia multiplă liniară.

Fişierul de date primare sau baza de date este reprezentat printr-o matrice dreptunghiulară, de dimensiuni $m \times l$, în care m reprezintă numărul de determinări experimentale (liniile matricei) iar l reprezintă numărul total de variabile măsurate, intrări şi ieşiri ale sistemului.

Indexul unei variabile reprezintă poziția acelei variabile în baza de date. De regulă, baza de date poate conține un număr mult mai mare de variabile de proces decât numărul de variabile de intrare luate în considerare în modelul matematic, iar acestea nu sunt ordonate în mod corespunzător (variabila de intrare cu numărul 1 nu se găseşte în coloana 1 a bazei de date). De asemenea variabila de ieşire a modelului nu are poziție fixă în baza de date.

În figura 2.12 este prezentată funcția *Date primare*. Baza de date este încărcată dintr-un fişier de date ASCII, organizat sub formă de coloane, vezi tabelul 2.7. Indexul ieşirii este selectat la valoarea 10, numărul de intrări luate în considerare este 2 iar indexul intrărilor au valorile 1 şi 3, corespunzător debitului alimentării şi temperaturii în bază.

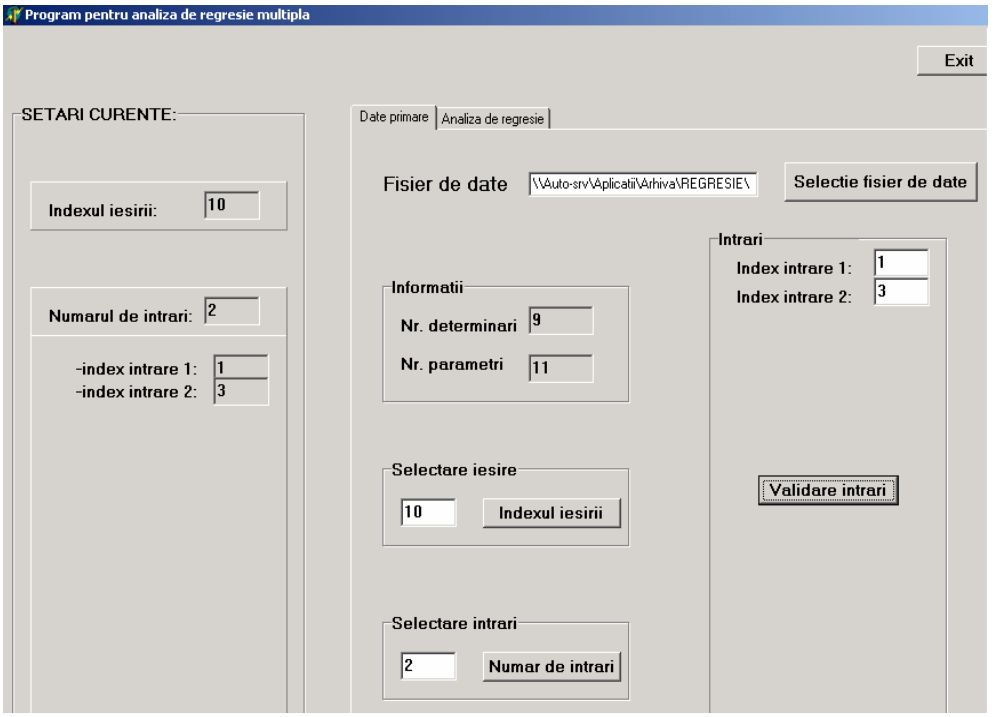


Fig. 2.12. Funcția *Date primare*.

O imagine a rezultatelor obținute cu ajutorul sistemului de programe **SregMul** pentru varianta descrisă anterior este prezentată în figura 2.13.

Pentru problema dată se vor analiza 7 variante, cuprinzând între 2 şi 5 variabile de intrare. Pentru fiecare dintre aceste variante, se identifică indexul fiecărei variabile din baza de date experimentale, tabelul 2.8, şi se determină parametrii statistici abatere standard şi abaterea relativă maximă a valorii estimate în raport cu valoarea experimentală.

Selectarea celei mai bune ecuații de regresie este realizată pe baza următoarelor criterii:

a) abaterea standard;
b) abatere relativă maximă;
c) complexitatea calculelor.

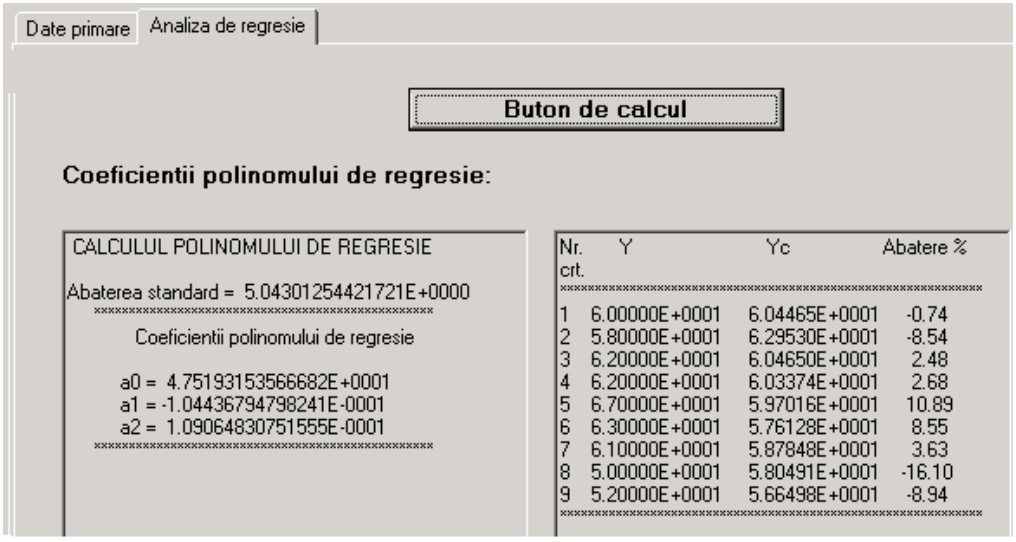


Fig. 2.13. Rezultatele numerice generate de funcția ***Analiza de regresie***.

Interpretarea rezultatelor obținute la regresia multiplă liniară sunt prezentate în tabelul 2.9. Analiza acestora indică două modele de regresie acceptabile (variantele 4 şi 7) şi un model de regresie recomandat, varianta 5.

Tabelul 2.8

Variante asociate mărimilor de intrare

Variantă	Intrări			Rezultate statistice	
	Număr	Index	Semnificație	Abatere standard	Abatere relativă
1	2	1	Debit alimentare	5,0430125	16,10
		3	Temperatura bază		
2	2	4	Presiune varf	2,9847169	10,30
		5	Debit reflux		
3	3	1	Debit alimentare	4,7246172	14,51
		3	Temperatura bază		
		7	Debit benz. stabilizată		
4	3	1	Debit alimentare	2,5579735	5,19
		3	Temperatura bază		
		5	Debit reflux		
5	4	1	Debit alimentare	2,2075714	5,85
		3	Temperatura bază		
		7	Debit benz. stabilizată		
		5	Debit reflux		
6	4	1	Debit alimentare	4,4048636	10,91
		3	Temperatura bază		
		7	Debit benzină stabilizată		
		4	Presiune varf		
7	5	1	Debit alimentare	2,0819980	6,00
		3	Temperatura bază		
		7	Debit benz. stabilizată		
		5	Debit reflux		
		4	Presiune varf		

Tabelul 2.9

Rezultate comparative asociate modelului matematic staționar al procesului de stabilizare a benzinei

Varianta	Număr variabile	Abatere standard [°C]	Abatere relativă maximă [%]	Observații
1	2	5,0430125	16,10	Modelul nu este acceptabil
2	2	2,9847169	10,30	Modelul nu este acceptabil
3	3	4,7246172	14,51	Modelul nu este acceptabil
4	3	2,5579735	5,19	Modelul este acceptabil
5	4	2,2075714	5,85	Modelul este recomandat
6	4	4,4048636	10,91	Modelul nu este acceptabil
7	5	2,0819980	6,00	Modelul este acceptabil

În cele ce urmează, se va opera cu modelul de regresie care prezintă performanțele cele mai bune, respectiv modelul 4. Valorile coeficienților acestui model de regresie sunt prezentați în tabelul 2.10.

Tabelul 2.10

Valorile coeficienților modelului de regresie recomandat

Coeficient	Valoare	Semnificație tehnologică
a_0	5,3338021E1	-
a_1	-1,8031407E-1	Debit alimentare
a_2	-4,3853975E-2	Temperatura bază
a_3	2,4531571E-1	Debit benzină stabilizată
a_4	2,9721779E-1	Debit reflux

Având în vedere rezultatele din tabelul 2.10, expresia concretă a modelului matematic al procesului de stabilizare a benzinei devine

$$T^{fin} = 53{,}338021 - 0{,}18031407 * G_{mp} - 0{,}043853957 * T^{B} + \\ + 0{,}2453157 * B + 0{,}29721779 * L .$$

3. ALGORITMI DE OPTIMIZARE UNIDIMENSIONALĂ

În multe aplicaţi tehnice, în structura funcţiilor obiectiv sunt incluse variabile ce aparţin modelelor matematice ale sistemelor la care sunt asociate funcţiile obiectiv. Un exemplu în acest sens îl constituie conducerea optimală a procesului de fracţionare în regim staţionar. Deşi funcţia obiectiv are o structură relativ simplă, datorită variabilelor care sunt incluse în structura acesteia (comenzi şi ieşiri) este necesară rezolvarea modelului matematic al procesului de fracţionare la fiecare evaluare a funcţiei obiectiv. Legăturile complexe dintre variabilele modelului matematic al procesului de fracţionare şi funcţia obiectiv conduc la imposibilitatea derivării analitice a funcţiei obiectiv în raport cu variabilele acesteia. În acest caz metodele analitice clasice nu mai pot fi utilizate.

Metodele expuse în cadrul acestui capitol oferă căile cele mai frecvent abordate în proiectarea şi conducerea optimală a proceselor şi în special a proceselor chimice. Caracteristica comună a acestor metode o constituie algoritmul de localizare a optimului, bazat pe evaluări a funcţiei obiectiv pentru diferite combinaţii de valori ale variabilelor independente. După modul în care sunt utilizate informaţiile obţinute prin evaluarea funcţiei obiectiv, există trei clase distincte de metode de optimizare fără restricţii:

- metoda explorării exhaustive;
- metode de eliminare.
- metode de interpolare.

3.1. Metoda explorării exhaustive

Cea mai simplă metodă pentru localizarea optimului constă în calcularea valorii funcției obiectiv într-un număr de puncte, de coordonate $x^k, k = 1,\ldots,n$. Prin analiza valorilor obținute se alege ca optim punctul pentru care funcția obiectiv este minimă sau maximă. Dacă δ^- şi δ^+ sunt paşii rețelei în jurul punctului estimat drept optim prin metoda explorării exhaustive, optimul real al funcției obiectiv se poate găsi oriunde în interiorul segmentului cu latura $\delta_{opt}^- + \delta_{opt}^+$.

3.1.1. Algoritmi de explorare exhaustivă

Metoda explorării exhaustive, deşi extrem de simplă, are unele aplicații interesante, printre care se pot număra:

- determinarea optimului şi a poziției sale într-un şir de valori;
- determinarea optimului prin explorarea funcției obiectiv şi analiza comparativă a două valori succesive.

Determinarea optimului şi a poziției sale într-un şir de valori. Se consideră un set de date $(x_i, y_i), i = 1,\ldots,n$ în care $y_i = f_{ob}(x_i)$. +irul de valori y_i prezintă un minim (maxim). Se cere determinarea valorii minime (maxime) a şirului y_i, poziția minimului în şirul de valori y_i şi a valorii argumentului x_i corespunzătoare minimului (maximului) determinat.

Etapele algoritmului de determinare a minimului dintr-un şir sunt următoarele:

1. Inițializarea valorii minimului, $y_{\min} = y_1$ şi a valorii acestuia, $poz = 1$, ca primă valoare din şirul considerat.
2. Testarea valorii curente y_i în raport cu valoarea minimului $y_{\min}$, pentru elementele $i = 2,\ldots,n$. Dacă $y_i > y_{\min}$, atunci minimul şi poziția acestuia se schimbă: $y_{\min} = y_i$ şi $poz = i$.
3. La sfârşitul testării, valoarea minimă a şirului va fi $y_{\min}$, poziția minimului poz, iar valoarea argumentului corespunzător minimului determinat x_{poz} .

Algoritm de determinare a optimului pe baza minimului unui şir. Se consideră o funcție unimodală $f(x)$, al cărei minim este cuprins în intervalul $[x_a, x_b]$. Algoritmul conține etapele:

a) Calcularea pasului de explorare, $\Delta x = \dfrac{x_b - x_a}{n}$.

b) Calcularea perechilor de valori $(x_i, y_i), i = 1,\ldots,n$, prin tabelarea funcției $f(x)$ în n puncte.

c) Determinarea minimului $y_{\min}$ din şirul de valori $y_i, i = 1,\ldots,n$ şi a poziţiei acestuia poz.
d) Dacă $\Delta x \le \varepsilon$, atunci optimul se consideră determinat, $y_{opt} = y_{\min}$. În caz contrar se formează un nou interval $\left[x_{poz-1}, x_{poz+1}\right]$ şi se reia etapa 1.

Algoritmul de determinare a minimului (maximului) dintr-un şir de valori are aplicaţii în programarea liniară.

Determinarea optimului prin explorarea funcţiei obiectiv şi analiza comparativă a două valori succesive. Există procese tehnologice, în special în industria chimică, pentru care nu sunt disponibile modele matematice. Pentru aceasta categorie de procese, problema conducerii optimale prezintă un aspect particular, fiind realizată prin intermediul regulatoarelor extremale.

Prin natura sa procesul prezintă o caracteristică statică (curba de funcţionare) cu punct de extrem. Datorita imposibilităţii modelarii matematice a procesului, nu se poate cunoaşte aprioric caracteristica statică a acestuia şi implicit valoarea şi poziţia extremului.

Pentru determinarea extremului se procedează în modul următor:

a) Se consideră un sens şi un pas de căutare pe direcţia de explorare. Sensul de căutare trebuie ales astfel înc`t funcţia obiectiv să scadă, în cazul determinării minimului, sau să crească, în cazul determinării maximului.
b) Se consideră o valoare iniţiala a argumentului şi a funcţiei obiectiv.
c) Pentru pasul curent *k*, se modifică valoarea argumentului funcţiei obiectiv conform sensului şi pasului de explorare. Se receptează din proces elementele necesare calculului valorii funcţiei obiectiv corespunzătoare argumentului.
d) Dacă valoarea funcţiei obiectiv descreşte, sensul de explorare este bine ales şi se continuă explorarea conform punctului c.
e) În cazul în care valoarea funcţiei obiectiv creşte în raport cu valoarea anterioară (cazul determinării minimului) sensul de căutare se inversează, se micşorează pasul de căutare şi se continuă explorarea conform punctului c.
f) Extremul se consideră determinat când pasul de căutare este mai mic dec`t o valoare impusă.

O aplicaţie industrială a acestui algoritm de optimizare este întâlnită în cadrul regulatoarelor extremale pas cu pas. În cazul determinării minimului, relaţiile ce caracterizează regulatorul extremal pas cu pas sunt următoarele:

$$u(k) = u(k-1) + r(k)\Delta u\,, \qquad (3.1)$$

$$r(k)=\begin{cases} r(k-1); f_{ob}(k) \leq f_{ob}(k-1) \\ -r(k-1); f_{ob}(k) > f_{ob}(k-1) \end{cases}, \tag{3.2}$$

având condițiile inițiale

$$\begin{cases} r(1)=-1 \\ u(1)=u_0 \\ \Delta u = \Delta u_0 \end{cases}, \tag{3.3}$$

în care k reprezintă pasul curent de căutare; u - valoarea argumentului funcției obiectiv;
Δu - valoarea pasului de căutare; f_{ob} - valoarea funcției obiectiv; r - sensul de căutare definit prin $r=\begin{cases} 1, & \text{pentru sensul de crestere} \\ -1, & \text{pentru sensul de scadere} \end{cases}$.

3.1.2. Studiu de caz.
Reglarea optimală a combustiei în cuptoare tubulare

Se consideră un cuptor tubular dintr-o instalație de distilare atmosferică (DA), figura 3.1.

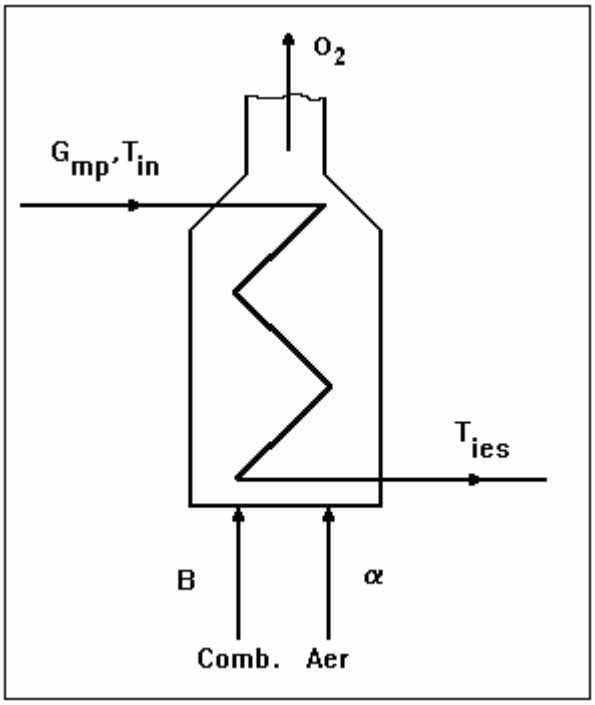


Fig. 3.1. Cuptor tubular: G_{mp} debit de materie primă;
T_{in}/T_{ies} - temperatura de intrare/ieşire a materiei prime; B - debitul de combustibil; α - coeficientul cantitati de aer;
x_{O2} – concentrația oxigenului în gazele de ardere.

Sistemul cuptor tubular este caracterizat prin mărimile: $\boldsymbol{Y}^T = [T_{ies}, x_{O2}]$; $\boldsymbol{P}^T = [G_{mp}, T_{in}]$; $\boldsymbol{U}^T = [B, \alpha]$.

Modelul matematic al procesului, $\boldsymbol{Y} = f(\boldsymbol{P}, \boldsymbol{U})$, are forma ă26î

$$T_{ies}(\alpha) = \begin{cases} a_{01} + a_{11} G_{mp} + a_{21} T_{in} + a_{31} B + a_{41} \alpha, & \alpha < \alpha^c \\ a_{02} + a_{12} G_{mp} + a_{22} T_{in} + a_{32} B + a_{42} \alpha, & \alpha \geq \alpha^c \end{cases}, \tag{3.4}$$

în care T_{ies} este temperatura de ieşire a petrolului prelucrat;

G_{mp} - debitul de petrol;

T_{in} - temperatura de intrare a petrolului;

B - debitul de combustibil;

α - coeficientul cantității de aer (mărime derivată din debitul de aer);

α^c - valoarea minimă a coeficientului de aer pentru care arderea în cuptor este completă.

Coeficienții din modelul (3.4) au valori specifice fiecărui domeniu de ardere:

a) ardere incompletă $\left\{ \begin{array}{ll} a_{01} = 0{,}12587150200 * 10^3 & [°C] \\ a_{11} = -0{,}3929296 * 10^{-3} & [°C/kg/h] \\ a_{21} = 0{,}3671257 & \\ a_{31} = 0{,}1200484 * 10^{-1} & [°C/kg/h] \\ a_{41} = 0{,}1312911 * 10^3 & [°C] \end{array} \right\}$;

b) ardere completă $\left\{ \begin{array}{ll} a_{02} = 0{,}3077407 * 10^3 & [°C] \\ a_{12} = -0{,}4261158 * 10^{-3} & [°C/kg/h] \\ a_{22} = 0{,}3666044 & \\ a_{32} = 0{,}1255206 * 10^{-1} & [°C/kg/h] \\ a_{42} = -0{,}3013083 * 10^3 & [°C] \end{array} \right\}$.

Cuptorul tubular este operat în condițiile $G_{mp} = 200000$ kg/h, $T_{in} = 250$ °C, $B = 4500$ kg/h iar valoarea minimă a coeficientului de aer pentru care arderea în cuptor este completă este $\alpha^c = 1{,}1$.

Structura clasică de conducere a procesului este prezentată în figura 3.2. Procesul de ardere şi de transfer termic din cuptorul tubular prezintă o caracteristică statică neliniară, cu punct de extrem. Funcția obiectiv este reprezentată de temperatura produsului încălzit T_{ies} iar variabila acestei funcții este comanda debitul de aer Q_{aer} (sau coeficientul cantității de aer), figura 3.3. În cazul unui cuptor real, caracteristica statică nu poate fi cunoscută cantitativ aprioric, însă forma acesteia (caracterul extremal) ram`ne neschimbată.

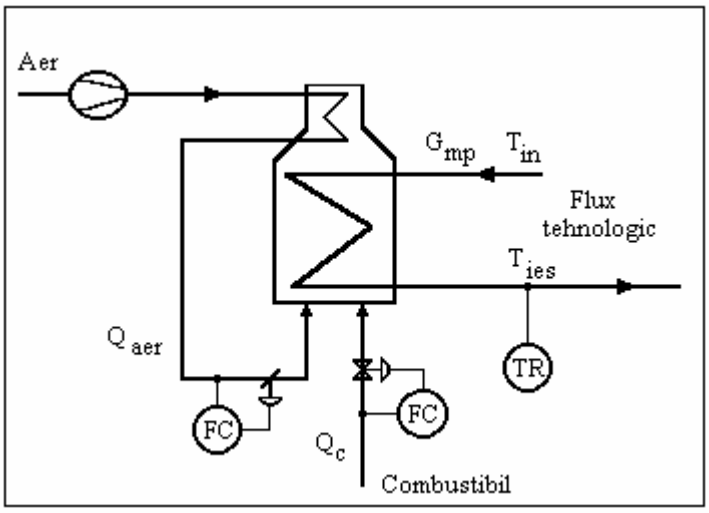


Fig. 3.2. Structura de reglare asociată unui cuptor tubular .

Pentru reglarea optimală a procesului de combustie se are în vedere un algoritm de explorare unidimensională, similar cu algoritmul extremal pas cu pas. Se consideră ca punct inițial valoarea 1,49 a coeficientului cantității de aer *alfa*, şi sensul de căutare în care *alfa* descreşte, respectiv $r = -1$. Pentru aceasta valoare a comenzii procesului (argumentului funcției obiectiv) se obține o valoare a temperaturii (funcția obiectiv) corespunzătoare punctului A de pe caracteristica statică a cuptorului tubular. Algoritmul va modifica valoarea comenzii (valoarea argumentului) în sensul scăderii acesteia, obținându-se astfel punctul B de pe caracteristică. Deoarece valoarea funcției obiectiv creşte, se continuă căutarea, menținându-se sensul inițial de căutare (sens corespunzător scăderii coeficientului cantității de aer). După obținerea punctului D de pe caracteristica statică a procesului, la următorul pas se va obține punctul E, pentru care valoarea funcției obiectiv scade în raport cu valoarea anterioară. În acest caz se procedează la inversarea sensului de căutare şi se continuă explorarea.

Dacă se menține constant pasul de căutare, după două iterații se va proceda din nou la inversarea sensului de căutare, punctul D de pe caracteristica procesului. În aceasta situație, punctul de extrem se va găsi în intervalul delimitat de punctele D şi E de pe caracteristica statică a procesului. Micşorarea progresivă a pasului de căutare conduce la reducerea intervalului de incertitudine dar nu şi la determinarea valorii exacte a optimului.

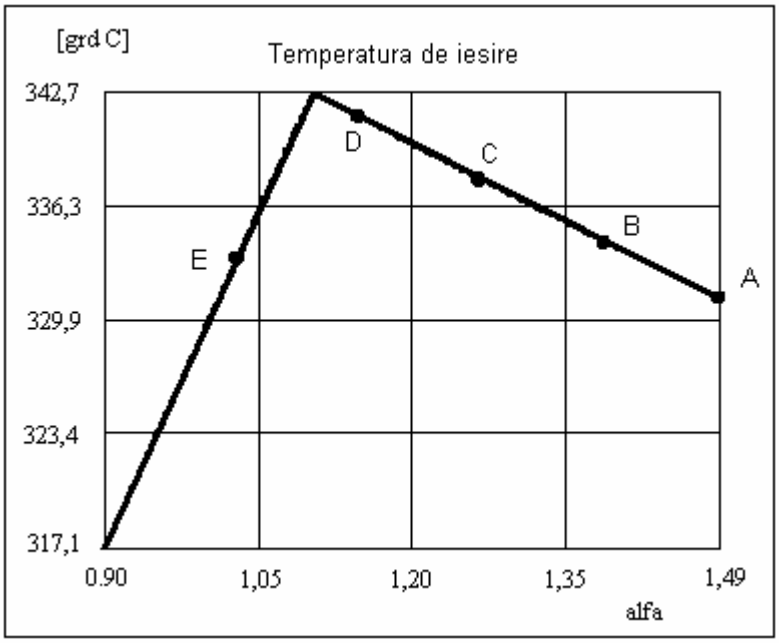


Fig. 3.3. Caracteristica statică a unui cuptor tubular.

Pentru cuptorul industrial prezentat în figura 3.2, sarcina principală a sistemelor automate o reprezintă menţinerea temperaturii produsului la ieşirea din cuptor T_{ies} la valoarea tehnologică impusă. Structura clasică de conducere a procesului este prezentată în figura 3.4.

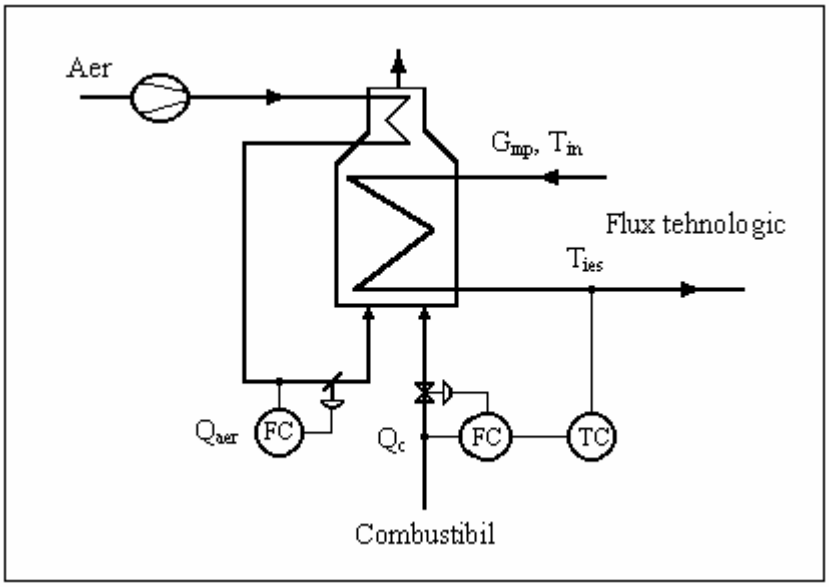


Fig. 3.4 Structura de reglare asociată unui cuptor tubular.

În condiţiile funcţionării SRA-T, pentru un debit de produs G_{mp} şi o temperatură de intrare T_{in} date, debitul de combustibil va fi dependent de

debitul de aer la care este operat cuptorul industrial, caracteristica fiind prezentată în figura 3.5. Funcția obiectiv asociată sistemului chimic este debitul de combustibil iar variabila independentă este debitul de aer. Aplicând relațiile asociate regulatorului extremal pas cu pas (3.1) - (3.3), se va determina un interval în care se găseşte punctul optim de operare a cuptorului tubular. Realizarea industrială a unui sistem de reglare optimală a combustiei bazat pe regulatorul extremal pas cu pas este mult mai dificilă, deoarece cuptorul nu trebuie operat în domeniul arderii incomplete (domeniu aflat în stânga punctului de optim).

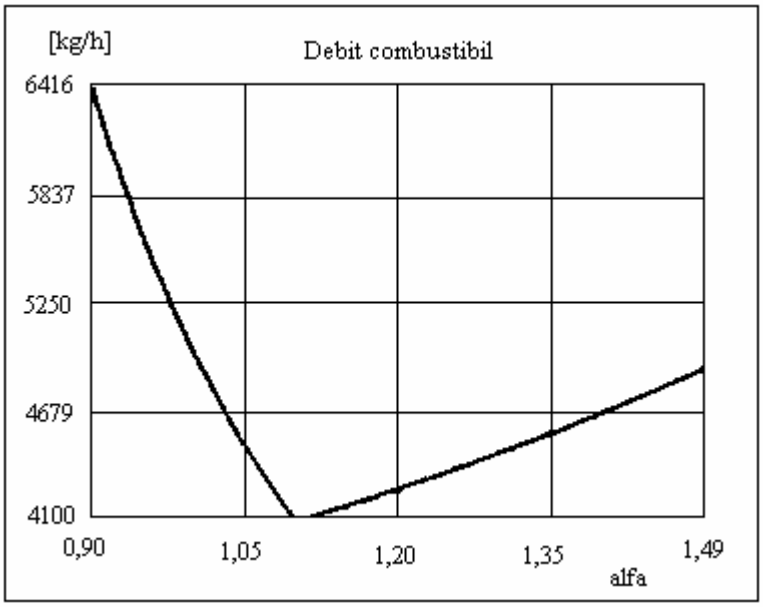


Fig. 3.5. Caracteristica statică a cuptorului tubular prevăzut cu SRA-T.

3.2. Metode de eliminare

Metodele de eliminare reprezintă o categorie de algoritmi de optimizare, care, prin comparația a două sau mai multe valori ale funcției obiectiv, pot conduce la *eliminarea* unei regiuni a domeniului de variație asociat variabilei independente *x*, regiune care nu poate conține optimul. Această tehnică de eliminare are ca efect reducerea domeniului explorat, reprezentând un grad superior de utilizare a informației dobândite prin calculul valorilor funcției obiectiv.

Metodele de eliminare unidimensională prezintă un interes aparte, fiind utilizate direct în diverse aplicații sau indirect, în cadrul unor algoritmi de optimizare multidimensională.

3.2.1. Principiul metodelor de eliminare

Metodele de eliminare unidimensională implică stabilirea apriorică a intervalului care conține optimul unei *funcții unimodale*. Caracterul unimodal al funcției permite ca, prin examinarea a cel puțin două valori ale funcției obiectiv, să se determine un nou interval, mai restrâns decât cel inițial, interval care să conțină extremul funcției.

Se consideră o funcție monovariabilă $f(x)$, continuă şi unimodală, având minimul situat în intervalul (x_a, x_b). Fie două puncte x_1 şi x_2, situate în intervalul inițial (x_a, x_b). }n funcție de valorile $f(x_1)$ şi $f(x_2)$, pot apare următoarele situațiil prezentate în figura 3.6:

a) $f(x_1) < f(x_2)$; minimul nu poate fi între x_2 şi x_b şi în consecință subintervalul (x_2, x_b) este eliminat;
b) $f(x_1) > f(x_2)$; minimul nu poate fi între x_a şi x_1 şi în consecință subintervalul (x_a, x_1) este eliminat;
c) $f(x_1) = f(x_2)$; minimul se găseşte între x_1 şi x_2 şi în consecință se elimină subintervalele (x_a, x_1) şi (x_2, x_b).

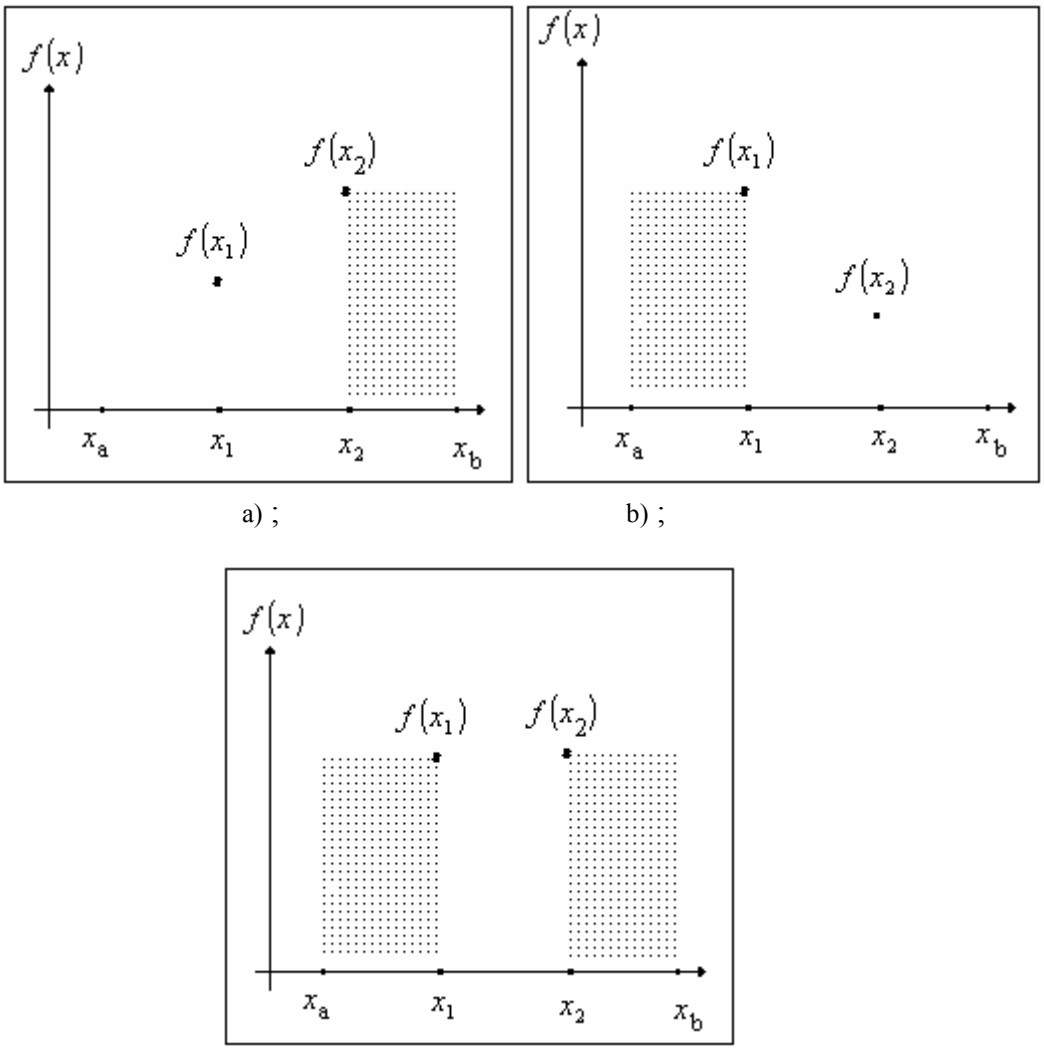
Intervalele menționate vor fi eliminate, iar la reluarea algoritmului pentru noul interval, se va căuta să se folosească valoarea $f(x_1)$ în cazul eliminării prezentate la punctul a) sau valoarea $f(x_2)$ pentru cazul b) sau ambele valori în cazul c).

Eficiența metodelor de eliminare este strâns legată de efortul de calcul necesar reducerii intervalului inițial. Dacă m^k este cel mai bun punct găsit după *k* evaluări ale funcției obiectiv, iar a^k şi b^k sunt puncte vecine (stânga, dreapta) se pot scrie relațiile:

$$f(\mathrm{m}^k) = \min_{1 \le j \le k} f(x^j), \tag{3.5}$$

$$a^k = \min_{x^i < m^k} (x^i), \tag{3.6}$$

$$b^k = \max_{x^i > m^k} (x^i). \tag{3.7}$$



a) ; b) ;

c).

Figura 3.6. Variante de eliminare: a) $f(x_1) < f(x_2)$;
b) $f(x_1) > f(x_2)$; c) $f(x_1) = f(x_2)$.

Considerând funcția $f(x)$ unimodală, minimul va fi cuprins între a^k şi b^k, intervalul $[a^k, b^k]$ fiind cunoscut sub numele de *interval de incertitudine după k măsurători*

$$a^k \le x^{opt} \le b^k. \tag{3.8}$$

O măsură a eficienței diferitelor metode de eliminare o constituie raportul R^k între mărimea intervalului de incertitudine după k măsuratori şi mărimea intervalului inițial

$$R^{\mathrm{k}} = \frac{\Delta^k}{\Delta^0} = \frac{b^k - a^k}{x_b - x_a}. \tag{3.9}$$

În relația (3.9), raportul R^k nu trebuie să depindă de problema rezolvată şi în consecință

$$\Delta^k = \max_{2 \le j \le k} (x^j - x^{j-2}). \tag{3.10}$$

Metoda de eliminare va optimă dacă Δ^{k} este minimizat la $\Delta^{opt,k}$, valoarea minimă a lui R^k fiind

$$R^{k,opt} = \frac{\Delta^{k,opt}}{\Delta^0} = \min_{x_1 \cdots x_k} \left[\max_{2 \le j \le k} \frac{x^j - x^{j-2}}{x_b - x_a} \right] . \tag{3.11}$$

Orice procedură de eliminare care satisface (3.11) poartă denumirea de *metodă tip* ***minmax.*** În funcție de modul în care sunt efectuate cele k evaluări ale funcției obiectiv, eliminarea poate fi *simultană* sau *secvențială.*

Eliminarea simultană este caracterizată prin faptul că toate cele k determinări sunt realizate independent una de alta, iar determinarea intervalului care conține optimul va fi făcută după ce se cunosc cele k valori ale funcției $f(x)$.

În conformitate cu conceptul *minmax*

$$x^1 = x_a,\ x^k = x_b, \qquad x^1 < x^2 < \ldots < x^k . \tag{3.12}$$

Dacă k este impar, strategia optimă de efectuare a determinărilor constă în aşezarea la distanță egală a punctelor numerotate par $(0, 2, 4, \ldots, k+1)$, determinările numerotate impar putând fi plasate oriunde între cele două puncte pare vecine. Intervalul inițial Δ^0 este redus astfel încât raportul R^{k} va avea valoarea

$$R^k = \frac{\Delta^k}{\Delta^0} = \frac{\Delta^k}{\left(\frac{k+1}{2}\right)\Delta^k} = \frac{2}{k+1} . \tag{3.13}$$

Dacă k este par, strategia optimă este unică ă9î.

<u>*Demonstrație*</u>. Notând $k = 2p$, relațiile (3.12) - (3.13) devin

$$\begin{cases} x^2 - x^0 = x_a \le \Delta^k \\ x^4 - x^2 \le \Delta^k \\ \ldots\ldots\ldots \\ x_b = x^{2p} - x^{2p-2} \le \Delta^k \end{cases}, \tag{3.14}$$

respectiv

$$x_b - x_a = \Delta^0 . \tag{3.15}$$

Considerând $x^0 = 0$ şi $x^{2p} = \Delta^0$, adunând toate inegalitățile (3.14) şi ținând cont de (3.15) se obține

$$\begin{cases} x^2 - x_a \le \Delta^k \\ x^4 - x^2 \le \Delta^k \\ \ldots\ldots \\ x_b - x^{2p-2} \le \Delta^k \end{cases},$$

sau

$$x_b - x_a \le \Delta^k ,$$

respectiv

$$x^{2p} \le \Delta^k . \tag{3.16}$$

Având în vedere $x^1 < x^2 < \ldots < x^k$ se poate scrie

$$x^{2j} - x^{2j-2} \le \Delta^k, \quad j = 1, \ldots, p . \tag{3.17}$$

Pentru a minimiza Δ^k/Δ^0 este necesară transformarea inegalităților în egalități şi micşorarea segmentului $\left(x^{2j}, x^{2j-1}\right)$. Respectiva distanță, numită *limită de rezoluție*, poate fi considerată o fractie ε din intervalul initial Δ^0 sau o fracție δ din intervalul final Δ^k

$$x^{2j} - x^{2j-1} \ge \varepsilon\Delta^0 = \delta\Delta^k . \tag{3.18}$$

În aceste condiții, raportul de eficiență R^k este

$$R^k = \frac{\Delta^k}{\Delta^0} = \frac{\varepsilon + 1}{\frac{k}{2} + 1} . \tag{3.19}$$

Eliminarea secvențială utilizează evaluările anterioare ale funcției $f(x)$ pentru reducerea intervalului de incertitudine. În clasa acestor metode se înscrie algoritmul înjumătățirii intervalului, algoritmul perechilor secvențiale, algoritmul Fibonacci, algoritmul secțiunii de aur.

3.2.2. Algoritmul perechilor secvențiale

Algoritmul perechilor secvențiale este un caz particular al metodei Bolzano, metodă care utilizează derivata funcției obiectiv ă3, 5, 32, 37î. În multe aplicații, funcția obiectiv nu se poate deriva analitic dar se poate înlocui derivata cu o pereche de valori cu ajutorul cărora să se aproximeze semnul derivatei. Astfel, dacă intervalul originar este cuprins între x_a şi x_b, x_1^1 este situat în centrul intervalului iar x_2^1 se găseşte la o distanță suficient de mică fata de x_1^2 , figura 3.7.

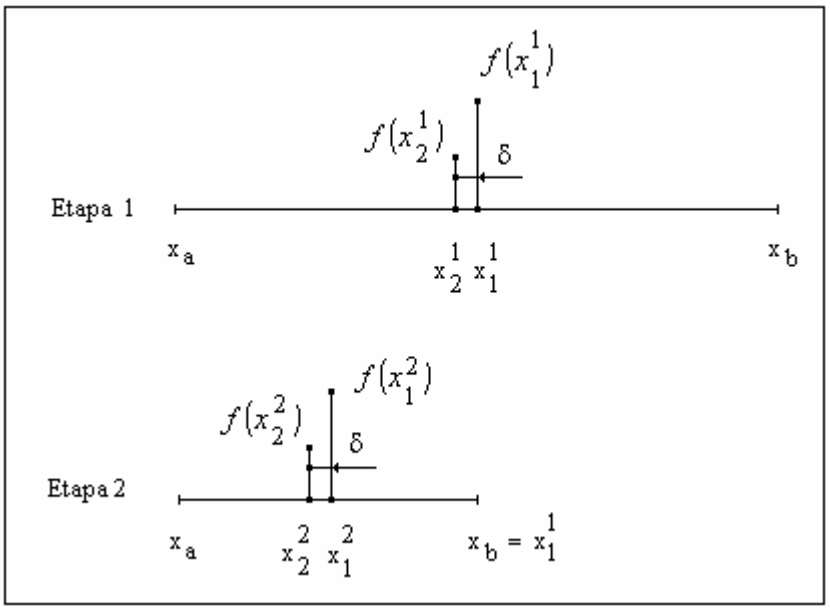


Fig. 3.7. Algoritmul perechilor secvențiale.

Relațiile de calcul sunt următoarele:

$$x_1^1 = \frac{x_a + x_b}{2}, \tag{3.20}$$

$$x_2^1 = x_1^1 - \delta \ . \tag{3.21}$$

Se presupune că $f(x_1^1) > f(x_2^1)$ şi în consecință subintervalul (x_1^1, x_b) va fi eliminat. Noul domeniu în care se găseşte optimul este (x_a, x_1^1). Realizând o translatare a limitei din dreapta, respectiv $x_b = x_1^1$, noul domeniu va fi notat (x_a, x_b) şi problema se reia cu o nouă etapa de eliminare.

Dacă se neglijează distanța δ, raportul de micşorare a intervalului inițial este

$$R^k = \frac{\Delta^k}{\Delta^0} = \frac{1}{2^{k/2}} . \tag{3.22}$$

Etapele algoritmului perechilor secvențiale.

Datele de intrare sunt reprezentate de:

a) x_a, x_b - limita inferioară şi superioară a intervalului de localizare a optimului;
b) ε - precizia impusă pentru determinarea optimului;
c) $f(x)$ - funcția obiectiv;
d) $n_{\max}$ - numărul maxim de iterații.

Algoritmul cuprinde următoarele etape:

- **Pasul 0**. Inițializarea variabilelor.
  $iter = 0$.
- **Pasul 1**. Calculul coordonatelor x_1 şi x_2.
  $$\Delta = x_b - x_a; \tag{3.23}$$
  $$\delta = \frac{\Delta}{10}; \tag{3.24}$$
  $$x_1 = \frac{x_a + x_b}{2}; \tag{3.20}$$
  $$x_2 = x_1 - \delta; \tag{3.21}$$
  $$f_1 = f(x_1), \quad f_2 = f(x_2);$$
  $$iter = iter + 1.$$
- **Pasul 2**. Eliminarea subintervalului care nu conține optimul.
  Dacă $f_1 > f_2$, $x_b = x_1$;
  Dacă $f_1 = f_2$, $x_b = x_1, x_a = x_2$;
  Dacă $f_1 < f_2$, $x_a = x_2$.
- **Pasul 3**. Criteriul de stop.
  Dacă $|x_b - x_a| > \varepsilon$ şi $iter < n_{\max}$ se reiau iterațiile cu pasul 1.
  În caz contrar se continuă cu pasul 4.
- **Pasul 4**. Calculul punctului de optim.
  $$x^{opt} = \frac{x_a + x_b}{2};$$
  $$f^{opt} = f\left(x^{opt}\right).$$

3.2.3. Algoritmul Fibonacci

În metoda perechilor secvențiale, la sfârşitul fiecarei eliminări, noul domeniu conține un punct pentru care se cunoaşte deja valoarea funcției obiectiv, respectiv punctul x_1^1, figura 3.7. În ipoteza unei reduceri impuse a intervalului inițial, pentru a micşora numărul de evaluari a funcției obiectiv se caută un nou mod de aranjare a punctelor din interiorul intervalului supus procedeului de eliminare, astfel încât, în noul interval, să se utilizeze două puncte din intervalul anterior.

Ipoteze. Pentru a se obține un interval de incertitudine de lungime egală Δ^1, indiferent de poziția acestuia, este necesar ca distanța dintre x_a şi x_1^1, respectiv distanța x_2^1 şi x_b să fie egale, figura 3.8

$$x_1^1 - x_a = x_b - x_2^1 = \Delta^1 . \tag{3.25}$$

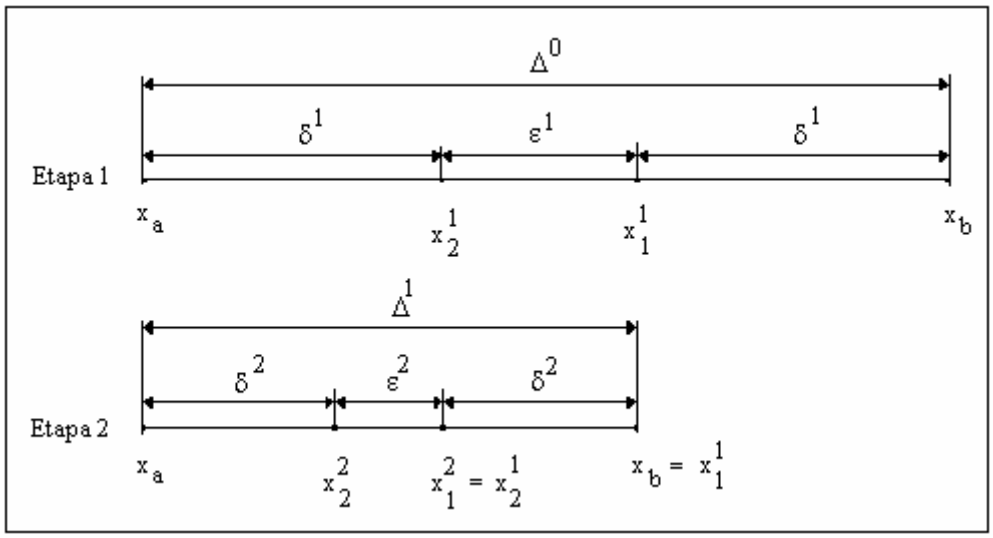


Fig. 3.8. Modul de calcul a punctelor x_1 şi x_2 în cadrul metodei Fibonacci.

Subintervalul care va fi eliminat este de lungime δ^1

$$x_2^1 - x_a = x_b - x_1^1 = \delta^1 \tag{3.26}$$

iar raportul de eficiență pentru prima eliminare este

$$\sigma^1 = \frac{\delta^1}{\Delta^0} . \tag{3.27}$$

Dacă noul interval de incertitudine este cuprins între x_a şi x_1^1, noua valoare a lui x_b va fi x_1^1. Se impune ca

$$x_1^2 = x_2^1 \tag{3.28}$$

şi în consecință

$$x_2^2 - x_a = x_b - x_1^2 = \delta^2 \tag{3.29}$$

iar raportul de eficiență va fi

$$\sigma^2 = \frac{\delta^2}{\Delta^1}. \tag{3.30}$$

Pentru ca metoda sa fie de tipul *minmax*, este necesar ca ultima determinare a poziției, cea de a N^a^ evaluare a funcției obiectiv corespunzătoare etapei de eliminare N-1, să fie situată cât mai aproape de centrul intervalului anterior

$$\lim \sigma^{N-1} = \frac{1}{2}. \tag{3.31}$$

Pornind de la aceasta cerință, se caută o legătură între valoarea limitei şi pozițiile punctelor x_1 şi x_2. Soluția acestei probleme este relația de recurență

$$\sigma^j = \frac{1-\sigma^{j+1}}{2-\sigma^{j+1}}. \tag{3.32}$$

Demonstrație. Pentru etapa de eliminare $j = 1$, figura 3.9, se poate scrie

$$\sigma^{j+1} = \frac{\delta^{j+1}}{\Delta^j}; \tag{3.33}$$

$$\sigma^{j+1} = \frac{\delta^{j+1}}{\Delta^j}; \tag{3.34}$$

$$\Delta^{j-1} = \Delta^j + \delta^j. \tag{3.35}$$

Eliminând δ^{j+1} între relațiile (3.33) – (3.34) se obține

$$\sigma^{j+1} = \frac{\Delta^j - \delta^j}{\Delta^j},$$

respectiv

$$\Delta^j\left(1-\sigma^{j+1}\right) = \delta^j. \tag{3.36}$$

Din relația (3.33), exprimată pentru etapa de eliminare *j*, rezultă

$$\delta^j = \sigma^j \Delta^{j-1} \tag{3.37}$$

respectiv relația (3.36) devine

$$\Delta^j\left(1-\sigma^{j+1}\right) = \sigma^j \Delta^{j-1}. \tag{3.38}$$

Din relația (3.35) se obține

$$\Delta^j = \Delta^{j-1} - \delta^j$$

şi înlocuind Δ^j în (3.38) rezultă

$$\left(\Delta^{j-1} - \delta^j\right)\left(1 - \sigma^{j+1}\right) = \sigma^j \Delta^{j-1}. \qquad (3.39)$$

Utilizând (3.37), se înlocuieşte δ^j în (3.39) şi se obţine

$$\Delta^{j-1}\left(1 - \sigma^j\right)\left(1 - \sigma^{j+1}\right) = \sigma^j \Delta^{j-1}. \qquad (3.40)$$

Prelucrând (3.40) se ajunge succesiv la următoarele expresii:

$$\left(1 - \sigma^j\right)\left(1 - \sigma^{j+1}\right) = \sigma^j;$$

$$2\sigma^j - \sigma^j \sigma^{j+1} = 1 - \sigma^{j+1},$$

respectiv relaţia (3.32)

$$\sigma^j = \frac{1 - \sigma^{j+1}}{2 - \sigma^{j+1}}.$$

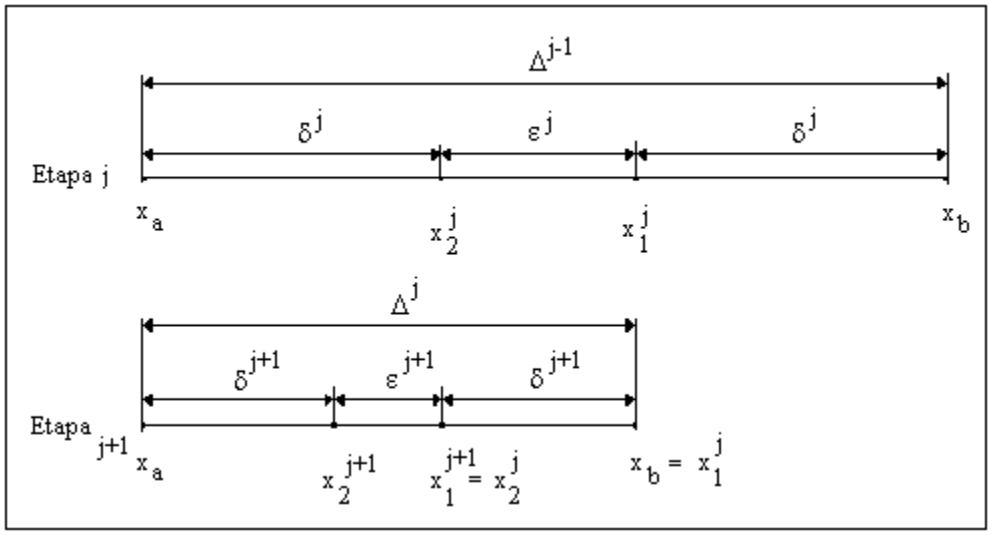


Fig. 3.9. Etapele de eliminare j şi $j+1$ pentru algoritmul Fibonacci

Pentru ultima determinare a poziţiei *N*, raportul de eficienta are valoarea $\sigma^{j+1} = 1/2$, fapt ce respectă ipoteza iniţială.

Şirul lui Fibonacci. Se exprimă raportul σ ca un raport de numere întregi

$$\sigma^j = \frac{\alpha^j}{\beta^j}. \qquad (3.41)$$

Pentru a determina expresia concretă a relaţiei (3.41) se procedează astfel. Egalând (3.32) şi (3.41) se obţine

$$\sigma^{j} = \frac{\alpha^{j}}{\beta^{j}} = \frac{1-\dfrac{\alpha^{j+1}}{\beta^{j+1}}}{2-\dfrac{\alpha^{j+1}}{\beta^{j+1}}} = \frac{\beta^{j+1}-\alpha^{j+1}}{2\,\beta^{j+1}-\alpha^{j+1}} \ ,$$

respectiv

$$\frac{\alpha^{j}}{\beta^{j}} = \frac{\beta^{j+1}-\alpha^{j+1}}{2\,\beta^{j+1}-\alpha^{j+1}} . \tag{3.42}$$

Relația (3.42) se transformă în sistemul de ecuații

$$\begin{cases} \alpha^{j} = \beta^{j+1}-\alpha^{j+1} \\ \beta^{j} = 2\,\beta^{j+1}-\alpha^{j+1} \end{cases} \tag{3.43}$$

ale căror soluții sunt relațiile de recurență

$$\begin{cases} \alpha^{j} = \alpha^{j+1}+\alpha^{j+2} \\ \beta^{j} = 2\alpha^{j}+\alpha^{j+1} \end{cases} . \tag{3.44}$$

Din condiția limită (3.31), pentru etapa de eliminare N-1 se poate scrie

$$\sigma^{N-1} = \frac{\alpha^{N-1}}{\beta^{N-1}} = \frac{1}{2},$$

respectiv

$$\alpha^{N-1} = 1,$$

iar pentru etapa de eliminare N-2

$$\sigma^{N-2} = \frac{\alpha^{N-2}}{\beta^{N-2}} = \frac{1}{2},$$

respectiv

$$\alpha^{N-2} = 1.$$

Notându-se_

$$\alpha^{j} = F_{N-(j+1)} \tag{3.45}$$

relatia (3.44) devine

$$F_{N-(j+1)} = F_{N-(j+2)} + F_{N-(j+3)} \tag{3.46}$$

sau

$$F_i = F_{i-1} + F_{i-2}, \quad i = 2,\ldots,N \tag{3.47}$$

şi

$$F_0 = F_1 = 1 \tag{3.48}$$

unde F_i reprezintă un număr întreg.

Relația (3.45) si condițiile (3.46) definesc proprietățile unui şir celebru de numere întregi, respectiv şirul lui *Leonardus filius Bonacci Pisano*. +irul lui Fibonacci începe cu numerele 0 şi 1, iar fiecare număr următor este egal cu suma celor două numere care îl preced. O exemplificare a termenilor şirului este următoarea:

1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144, 233, 377, 610, 987, etc. (3.49)

Expresia termenului general al şirului lui Fibonacci este

$$F_i = \frac{1}{\sqrt{5}}\left[\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{i+1} - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^{i+1}\right]. \tag{3.50}$$

Având în vedere soluția (3.44) a sistemului de ecuații (3.43) şi notația (3.45) se obține o nouă expresie a termenului β^j, respectiv

$$\beta^j = F_{N-(j-1)} \ . \tag{3.51}$$

Înlocuind noile expresii ale numerelor α^j şi β^j, raportul de eliminare (3.41) devine

$$\sigma^j = \frac{\alpha^j}{\beta^j} = \frac{F_{N-(j+1)}}{F_{N-(j-1)}} \quad j = 1,2,\ldots,N-1 \ . \tag{3.52}$$

Calculul punctelor x_1^j ***şi*** x_2^j**.** Relațiile de calcul pentru punctele x_1^j şi x_2^j pot fi calculate pornind de la expresia raportului de eliminare (3.52) şi de la relațiile (3.33 - 3.35). Astfel raportul de eliminare (3.52) combinat cu relația (3.34) conduce la determinarea lungimii intervalului ce se elimină

$$\delta^j = \frac{F_{N-(j+1)}}{F_{N-(j-1)}}\Delta^{j-1}, \quad j = 1,2,\ldots,N-1 . \tag{3.53}$$

Coordonatele punctelor x_1^j şi x_2^j se determină din (3.24)

$$x_2^j = x_{\min} + \delta^j \tag{3.54}$$

si respectiv

$$x_1^j = x_{\max} - \delta^j . \tag{3.55}$$

Lungimea noului interval de incertitudine, obținut după eliminarea segmentului δ^j, este dat de

$$\Delta^j = \Delta^{j-1} - \delta^j . \tag{3.56}$$

Relațiile (3.53) - (3.56) alcătuiesc fondul metodei de eliminare.

Eficacitatea metodei lui Fibonacci este dată de raportul dintre mărimea intervalului de incertitudine obținut după N evaluări ale funcției obiectiv şi mărimea intervalului de incertitudine inițial

$$R^N = \frac{\Delta^N}{\Delta^0}. \tag{3.57}$$

Evaluarea raportului de eliminare R^k , corespunzător la k eliminări ale funcției obiectiv, implică determinarea relației între Δ^k şi Δ^0.

<u>*Demonstrație*</u>. Considerând că toate eliminările se fac după situația cea mai defavorabilă (numai un subinterval δ)

$$\Delta^j = \Delta^{j-1} - \delta^j$$

vom obține

$$\Delta^1 = \Delta^0 - \delta^1 = \Delta^0 - \frac{F_{N-2}}{F_N}\Delta^0 = \Delta^0 \frac{F_N - F_{N-2}}{F} = \Delta^0 \frac{F_{N-1}}{F_N}.$$

Prin generalizare se obține

$$\Delta^j = \frac{F_{N-j}}{F_N}\Delta^0 \tag{3.58}$$

ceea ce conduce la

$$R^N = \frac{\Delta^N}{\Delta^0} = \frac{F_{N-N}}{F_N} = \frac{1}{F_N}. \tag{3.59}$$

Calculul numărului total de determinări. În mod uzual criteriul de stop al metodelor de eliminare constă în atingerea unei valori date, maximale, a intervalului de incertitudine dupa k evaluări, Δ^k . Numărul total de evaluări ale funcției obiectiv, N, ce corespunde intervalului de incertitudine admisibil Δ^k este determinat din relația (3.58), sub forma

$$\Delta^N F^N = \Delta^0. \tag{3.60}$$

Termenul general al şirului Fibonacci F^k a fost prezentat anterior, ecuația (3.50), şi în aceste condiții ecuația (3.60) devine

$$f(N) = \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{N+1} - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^{N+1} - \sqrt{5}\frac{\Delta^N}{\Delta^0} = 0. \tag{3.61}$$

Deoarece N trebuie să fie un număr întreg, numărul de evaluări va fi considerat prima valoare întreagă, mai mare decât soluția determinată prin rezolvarea ecuației (3.61). La ultima etapă de eliminare $j = N-1$, cele două puncte x_1^{N-1} şi x_2^{N-1} coincid. Ca urmare, în cadrul metodei Fibonacci, etapa N devine inoperantă, neexistând două puncte distincte x_1 şi x_2.

Tratarea numerică a şirului Fibonacci reprezintă o problemă delicată în cadrul aplicaţiilor numerice. Evaluarea pe cale numerică a expresiei (3.50) necesită o programare atentă. În cele ce urmează sunt prezentate unele observaţii privind modul de implementare a acestei relaţii. Prezenţa în relaţia (3.50) a expresiei $\left(1-\sqrt{5}\right)^{N+1}$ conduce la situaţii în care operaţia de ridicare la putere nu poate fi efectuată numeric din cauza valorii negative a operandului $\left(1-\sqrt{5}\right)$. În acest caz, relaţia (3.50) se tratează distinct, în funcţie de caracterul par sau impar al puterii $N+1$, respectiv al indicelui *N*. Având în vedere situaţia dată, tratarea numerică a relaţiei (3.50) conduce la o evaluare de tipul

$$F_i = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{5}}\left[\left(\dfrac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{i+1} - \left(\dfrac{\left|1-\sqrt{5}\right|}{2}\right)^{i+1}\right], & i = impar \\ \dfrac{1}{\sqrt{5}}\left[\left(\dfrac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{i+1} + \left(\dfrac{\left|1-\sqrt{5}\right|}{2}\right)^{i+1}\right], & i = par \end{cases} . \qquad (3.62)$$

Pentru rezolvarea numerică, în numere întregi, a ecuaţiei (3.61) se utilizează tratarea numerică a şirului Fibonacci (3.62)

$$f(i) = \begin{cases} \left(\dfrac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{i+1} - \left(\dfrac{\left|1-\sqrt{5}\right|}{2}\right)^{i+1} - \sqrt{5}\,\dfrac{\Delta^0}{\Delta^N}, & i = impar \\ \left(\dfrac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{i+1} + \left(\dfrac{\left|1-\sqrt{5}\right|}{2}\right)^{i+1} - \sqrt{5}\,\dfrac{\Delta^0}{\Delta^N}, & i = par \end{cases} . \qquad (3.63)$$

Determinarea valorii *i* care reprezintă soluţia ecuaţiei (3.63) se găseşte prin încercări succesive, astfel încât

$$f(i) * f(i+1) < 0 . \qquad (3.64)$$

Valoarea căutată a numărului maxim de iteraţii necesar reducerii intervalului de incertitudine de la Δ^0 la Δ^N va fi

$$N = i + 1 . \qquad (3.65)$$

Prezentarea algoritmului de calcul bazat pe şirul lui Fibonacci.

Datele de intrare sunt reprezentate prin:

a) $x_{\min}, x_{\max}$ - limita inferioară şi superioară a intervalului de localizare a optimului;
b) ε - precizia impusă pentru determinarea optimului;
c) $f(x)$ - funcţia obictiv.

Algoritmul cuprinde următorii paşi :

- **Pasul 0.** Iniţializarea variabilelor.

$$\Delta^0 = x_{\max} - x_{\min}.$$

- **Pasul 1.** Determinarea numărului de iteraţii N prin rezolvarea ecuaţiei (3.60)

$$f(i) * f(i+1) < 0$$

unde $f(i)$ este definit prin (3.62)

$$N = i + 1.$$

- **Pasul 2.** Calculul coordonatelor x_1^j şi x_2^j, $j = 1,2,...,N-1$.

Intervalul δ^j care se va elimina este dat de relaţia (3.53)

$$\delta^j = \frac{F_{N-(j+1)}}{F_{N-(j-1)}} \Delta^{j-1};$$

în care numerele Fibonacci au expresiile

$$F_{N-(j+1)} = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{5}}\left[\left(\dfrac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{N-(j+1)} - \left(\dfrac{\left|1-\sqrt{5}\right|}{2}\right)^{N-(j+1)}\right], & N-(j+1) = impar \\ \dfrac{1}{\sqrt{5}}\left[\left(\dfrac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{N-(j+1)} + \left(\dfrac{\left|1-\sqrt{5}\right|}{2}\right)^{N-(j+1)}\right], & N-(j+1) = par \end{cases};$$

$$F_{N-(j-1)} = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{5}}\left[\left(\dfrac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{N-(j-1)} - \left(\dfrac{\left|1-\sqrt{5}\right|}{2}\right)^{N-(j-1)}\right], & N-(j-1) = impar \\ \dfrac{1}{\sqrt{5}}\left[\left(\dfrac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{N-(j-1)} + \left(\dfrac{\left|1-\sqrt{5}\right|}{2}\right)^{N-(j-1)}\right], & N-(j-1) = par \end{cases};$$

Punctele x_1^j şi x_2^j au expresiile

$$x_2^j = x_{\min} + \delta^j;$$

$$x_1^j = x_{\max} - \delta^j;$$

$$f_1 = f(x_1),\ f_2 = f(x_2).$$

- **Pasul 3.** Eliminarea subintervalului care nu conține optimul.

  Dacă $f_1 > f_2$, $x_{\max} = x_1^j$;
  Dacă $f_1 = f_2$, $x_{\max} = x_1^j$, $x_{\min} = x_2^j$;
  Dacă $f_1 < f_2$, $x_{\min} = x_2^j$.

- **Pasul 4.** Calculul punctului de optim.

  $x_{opt} = x_1^{N-1}$;
  $f_{opt} = f(x_{opt})$.

3.2.4. Metoda secțiunii de aur

Calculele laborioase asociate determinării numerelor din şirul Fibonacci au determinat modificări ale acestei metode, în scopul reducerii complexității şi efortului de calcul.

Ipoteze. Metoda secțiunii de aur are la bază trei ipoteze. Prima ipoteză se referă la modul de amplasare a punctelor x_1 şi x_2. Astfel, metoda secțiunii de aur respectă modul de aranjare a punctelor din cadrul metodei Fibonacci, astfel încât, în interval să se utilizeze două puncte din intervalul anterior, figura 3.10.

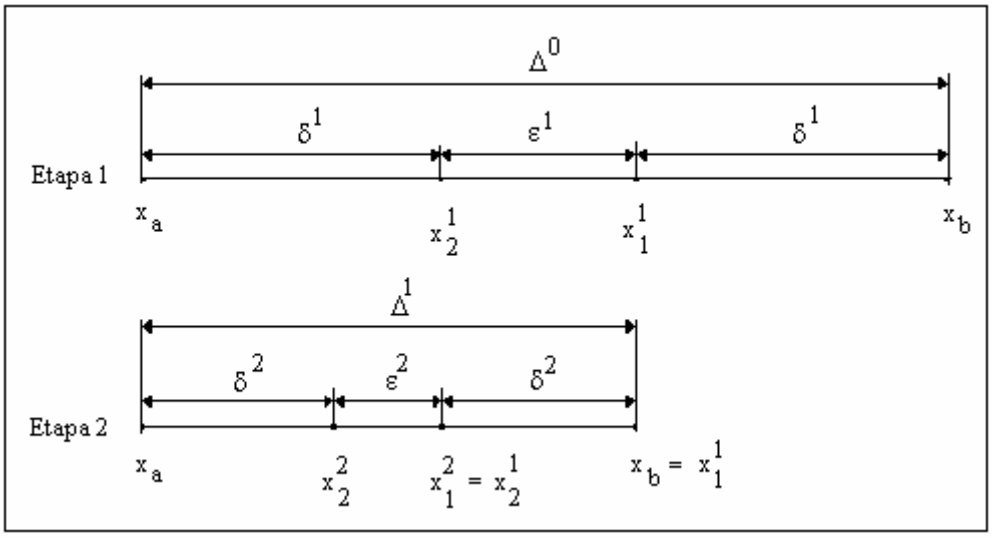


Fig. 3.10. Modul de efectuare a determinărilor valorii funcției $f(x)$ în cadrul metodei secțiunii de aur.

Cea de a doua ipoteză se referă la distanțele dintre x_a şi x_1^1 şi respectiv x_2^1 şi x_b, care sunt egale

$$x_1^1 - x_a = x_b - x_2^1 = \Delta^1 . \tag{3.25}$$

Ipoteza a treia impune ca raportul dintre două intervale consecutive de incertitudine să fie constant

$$s = \frac{\Delta^j}{\Delta^{j-1}} = const . \tag{3.66}$$

Pornind de la ipotezele (3.25) şi (3.66), se urmăreşte determinarea valorii numerice a constantei *s*.

<u>*Demonstraţie.*</u> Pentru etapele de eliminare j şi $j+1$, figura 3.11, se poate scrie

$$\Delta^{j-1} = \Delta^j + \delta^j \tag{3.67}$$

$$\delta^{j+1} = \varepsilon^j . \tag{3.68}$$

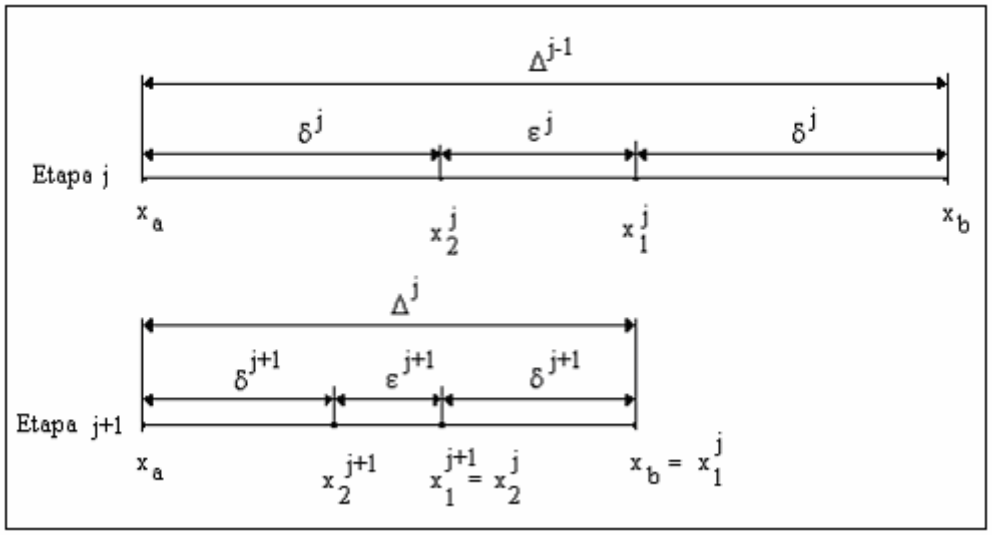


Fig. 3.11. Etapele de eliminare j şi $j+1$.

Având în vedere ipoteza (3.66) se caută exprimarea constantei *s* numai în funcţie de Δ^{j-1}, Δ^j şi Δ^{j+1}. Din analiza figurii 3.11 rezultă

$$\Delta^{j-1} = 2\delta^j + \varepsilon^j . \tag{3.69}$$

Elementul δ^j este exprimat din relaţia (3.67), respectiv

$$\delta^j = \Delta^{j-1} - \Delta^j , \tag{3.70}$$

ceea ce conduce la o nouă expresie a relaţiei (3.69)

$$\Delta^{j-1} = 2\left(\Delta^{j-1} - \Delta^j\right) + \varepsilon^j ,$$

respectiv

$$2\Delta^j = \Delta^{j-1} + \varepsilon^j . \tag{3.71}$$

Utilizând ipoteza (3.68), relația (3.71) devine

$$2\Delta^j = \Delta^{j-1} + \delta^{j+1}.$$

şi substituind δ^{j+1} cu $\Delta^j - \Delta^{j+1}$, se obține

$$2\Delta^j = \Delta^{j-1} + \Delta^j - \Delta^{j+1},$$

respectiv

$$\Delta^{j+1} = \Delta^{j-1} - \Delta^j. \tag{3.72}$$

Pentru a determina valoarea constantei s se recurge la ipoteza (3.66) formulată sub forma

$$\Delta^j = s * \Delta^{j-1} \tag{3.73}$$

sau

$$\Delta^{j+1} = s * \Delta^j = s^2 * \Delta^{j-1}. \tag{3.74}$$

Utilizând (3.73) şi (3.74) în relația (3.72) se obține

$$s^2 * \Delta^j = \Delta^{j-1} - s * \Delta^{j-1},$$

respectiv ecuația în s

$$s^2 = 1 - s. \tag{3.75}$$

Soluția reală pozitivă a ecuației (3.75) este

$$s \cong 0{,}618033989... \tag{3.76}$$

valoare ce permite împărțirea unui segment în părți estetic proporționale.

<u>*Istoric*</u>. Numărul transcedentral s este cunoscut din antichitate ca raport de împărțire a unui segment AB în două părți, astfel încât partea cea mai mare AC este medie proporțională între partea mai mică CB şi segmentul întreg, figura 3.12

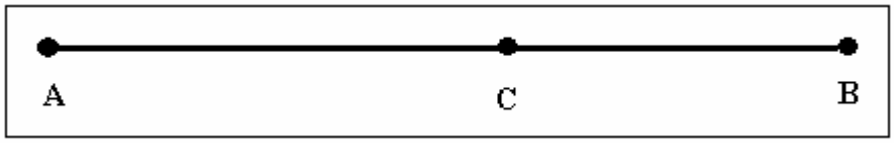


Fig. 3.12. Proprietățile secțiunii de aur.

Se defineşte raportul

$$\frac{CB}{AC} = \frac{AC}{AB}, \tag{3.77}$$

respectiv

$$AC^2 = CB \times AB. \tag{3.78}$$

Esteticienii au susţinut că această proporţie impresionează în mod deosebit de plăcut ochiul. O serie de monumente celebre în arhitectură, de la Platon şi până la operele lui Le Corbusier, au fost puse în proporţie după legea secţiunii de aur. Leonardo Da Vinci şi Albrecht Dürer au stabilit că segmentele corpului omenesc idealizat sunt subordonate, de asemenea, acestei proporţii. Numele de ***secţiune de aur*** sau ***tăietură de aur*** a fost dat de Ohm în 1835, tocmai datorită acestor proprietăţi deosebite.

Calculul punctelor x_1^j ***şi*** x_2^j**.** Relaţiile de calcul sunt deduse din relaţiile (3.66) şi (3.23):

$$\Delta^j = 0{,}618033989 * \Delta^{j-1}; \tag{3.79}$$

$$x_1^j = x_a + \Delta^j; \tag{3.80}$$

$$x_2^j = x_b - \Delta^j. \tag{3.81}$$

Eficienta metodei. Raportul de reducere după k eliminări este

$$R^k = \frac{\Delta^k}{\Delta^0}.$$

Dezvoltând raportul dat şi ţinând cont de (3.66) se obţine

$$R^k = \underbrace{\frac{\Delta^k}{\Delta^{k-1}} * \frac{\Delta^{k-1}}{\Delta^{k-2}} * \ldots * \frac{\Delta^1}{\Delta^0}}_{k-1} = \underbrace{\frac{1}{s} * \frac{1}{s} * \ldots * \frac{1}{s}}_{k-1} = \frac{1}{s^{k-1}}. \tag{3.82}$$

Prezentarea algoritmului secţiunii de aur. Datele de intrare sunt următoarele:

1. x_a, x_b - limita inferioară şi superioară a intervalului de localizare a optimului;
2. ε - precizia impusă pentru determinarea optimului;
3. $f(x)$ - funcţia obiectiv;
4. $n_{\max}$ - numărul de iteraţii maxim admis.

Algoritmul cuprinde următorii paşi:

- **Pasul 0**. Iniţializarea variabilelor.

  $j = 1;$

  $\Delta^0 = x_b - x_a.$

- **Pasul 1**. Calculul coordonatelor x_1^j şi x_2^j.

$$\Delta^j = 0{,}618033989 * \Delta^{j-1};$$

$$x_1^j = x_a + \Delta^j;$$

$$x_2^j = x_b - \Delta^j;$$

$$f_1 = f\left(x_1^j\right), \quad f_2 = f\left(x_2^j\right);$$

$$j = j + 1.$$

- **Pasul 2**. Eliminarea subintervalului care nu conține optimul.

  Dacă $f_1 > f_2$, $x_b = x_1^j$;

  Dacă $f_1 = f_2$, $x_b = x_1^j$, $x_a = x_2^j$;

  Dacă $f_1 < f_2$, $x_a = x_2^j$.

- **Pasul 3.** Criteriul de stop.

  Dacă $|x_b - x_{an}| > \varepsilon$ şi $j < n\max$ se reiau iterațiile cu pasul 1.

  În caz contrar se continuă cu pasul 4.

- **Pasul 4.** Calculul punctului de optim.

$$x_{opt} = \begin{cases} x_1^j, & f_1 \le f_2 \\ x_2^j, & f_1 > f_2 \end{cases}$$

$$f_{opt} = f\left(x_{opt}\right).$$

3.2.5. Aplicație. Determinarea raportului de contactare pentru reactorul de cracare catalitică

Estimarea parametrilor de operare nemăsurabili reprezintă o etapă a procesului de adaptare al modelului matematic al procesului de cracare catalitică. Uzual, datele de operare industriale au structura prezentată în figura 3.13. În tabelul 3.1 sunt prezentate date de operare din cadrul unei instalații industriale. Deşi reprezintă o mărime de intrare deosebit de importantă, raportul de contactare nu este direct măsurabil, acesta putând fi estimat prin calcule de bilanț termic. În lipsa unor date consistente pentru calculul bilanțului termic poate fi utilizată o tehnică de estimare numerică a raportului de contactare, bazată pe minimizarea funcției

$$f_{ob}\left(R_{cont}\right) = \frac{\left(T_R^{exp} - T_R^{mod\,el}\right)^2}{\left(T_R^{exp}\right)^2} + \frac{\left(Q_B^{exp} - Q_B^{mod\,el}\right)^2}{\left(Q_B^{exp}\right)^2}. \qquad (3.83)$$

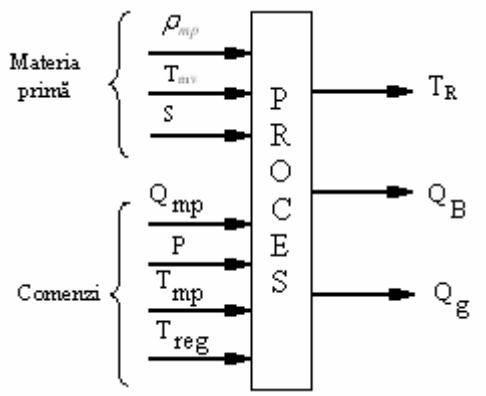


Fig. 3.13. Structura datelor de operare industriale.

Această funcție reprezintă abaterea adimensională a mărimilor de ieşire ale modelului, temperatura de ieşire din riser T_R şi debitul de benzină Q_B, în raport cu valorile industriale măsurate. Pentru minimizarea funcției (3.83) a fost realizat un program de calcul ce utilizează algoritmul secțiunii de aur.

Minimizarea funcției (3.83) permite o estimare reală a valorii raportului de contactare catalizator-materie primă, o comparație între valorile mărimilor de ieşire ale modelului şi datele industriale sunt prezentate în tabelul 3.2. O analiză detaliată a evoluției temperaturii riserului este prezentată în figura 3.14. Sunt observate abateri majore între model şi procesul industrial pentru setul de date 3, 8, 13 şi 18. Aceste abateri sunt cauzate de valorile mari ale debitului de alimentare, modelul propus nefiind aplicabil pentru valori mai mari de 20000 kg/h ale capacității de prelucrare a instalației. Şi în cazul debitului de benzină, cea de a doua componentă a funcției obiectiv (3.83), sunt semnalate discrepanțe majore pentru acelaşi set de date, figura 3.15.

Tabelul 3.1

Date industriale privind funcționarea blocului de reacție

de la cracarea catalitică.

Data	Densitate kg/dm^3	Continut sulf %	Temperatura medie volumetrica °C	Temperatura materie prima °C	Temperatura regenerator °C	Presiune reactor bar	Alimentare kg/h
1	912	0.40	304.5	203	711	1.37	176292
2	914	0.40	305.5	200	710	1.37	177083
3	900	0.36	301.1	204	711	1.39	524250
4	912	0.34	305.4	202	712	1.37	154333
5	905	0.36	303.5	202	711	1.33	154792
6	907	0.35	304.5	207	709	1.21	149042
7	907	0.32	304.8	205	706	1.17	155667
8	907	0.30	305.1	203	706	1.18	478330
9	904	0.38	304.5	196	708	1.24	161083
10	904	0.31	304.8	197	711	1.28	162292
11	908	0.37	306.5	198	711	1.26	157792
12	911	0.35	307.8	195	709	1.27	161750
13	912	0.15	308.4	195	705	1.27	501458
14	910	0.39	308.1	193	709	1.27	171000
15	912	0.34	309.1	194	710	1.27	173583
16	909	0.37	308.5	189	711	1.26	167083
17	907	0.32	308.1	191	712	1.30	169542
18	907	0.36	308.5	190	712	1.30	512292
19	906	0.33	308.4	191	712	1.30	170375
20	906	0.34	308.8	191	710	1.29	173167
21	910	0.36	310.5	190	708	1.29	174292
22	909	0.35	310.5	190	712	1.32	167333

Tabelul 3.2

Rezultate comparative obținute cu valoarea estimată a raportului de contactare

Data	Raport contactare estimat	Benzina ăkg/hî		Temperatura reactor ă°Cî		Gradul de aproximare
		instalatie	model	instalatie	model	
1	4,67	75417	80057	531	537	validare
2	4,36	82917	80208	531	526	validare
3	2,94	232667	165690	531	482	invalidare
4	4,16	83542	73036	531	519	validare
5	5,12	64208	73642	531	548	invalidare
6	4,25	75750	70169	530	521	validare
7	4,68	69375	71780	530	533	validare
8	2,83	229042	143660	530	473	invalidare
9	4,56	75583	75386	530	529	validare
10	4,35	79958	76522	530	524	validare
11	4,63	71167	73520	531	534	validare
12	4,59	74417	74613	531	531	validare
13	2,96	230083	151010	531	478	invalidare
14	4,26	86458	78173	531	520	validare
15	4,54	77875	78366	531	531	validare
16	4,43	79583	76808	531	526	validare
17	4,54	78333	78727	530	531	validare
18	2,86	246792	156950	530	475	invalidare
19	4,49	80208	79348	531	529	validare
20	4,57	80417	80213	531	530	validare
21	4,32	88417	79976	531	521	validare
22	4,48	79375	77997	531	528	validare

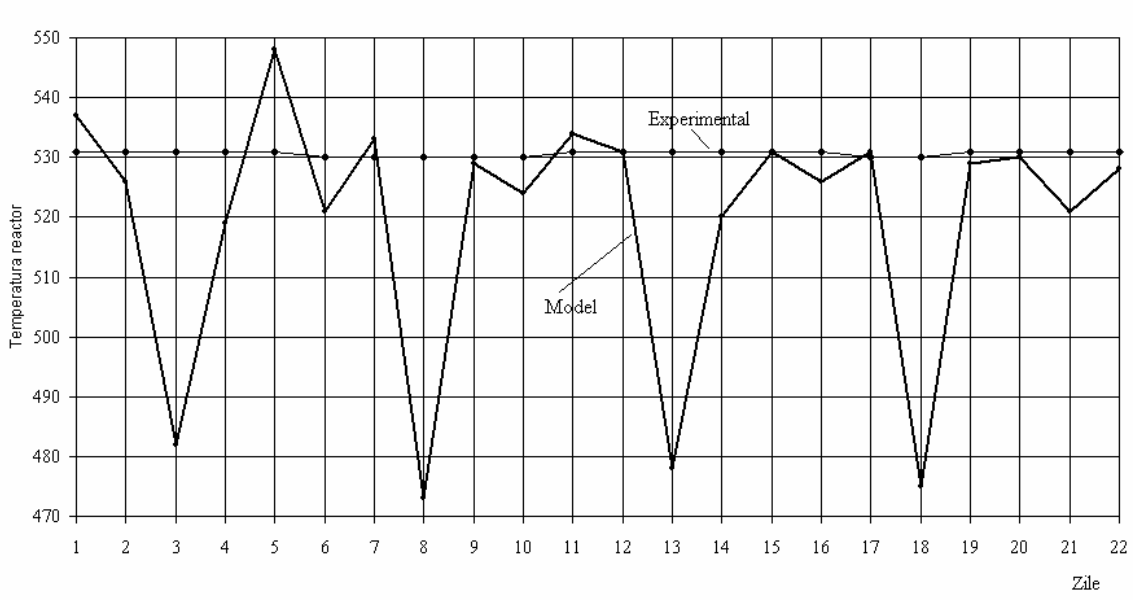


Fig. 3.14. Evoluția comparativă a temperaturii în reactor.

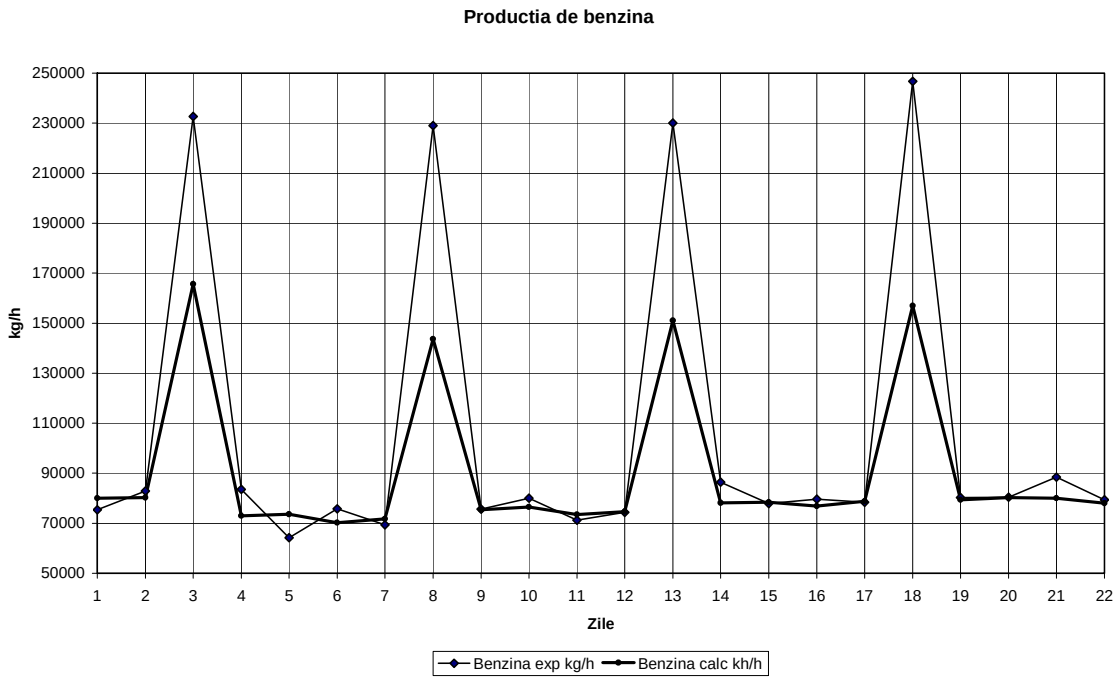


Fig. 3.15. Evoluția comparativă a debitului de benzină.

3.2.6. Studiu de caz. Conducerea optimală a unei coloane de fracționare

Se consideră o coloană de fracționare a unui amestec binar propenă - propan, prevăzută cu o structură de automatizare convențională, figura 3.16.

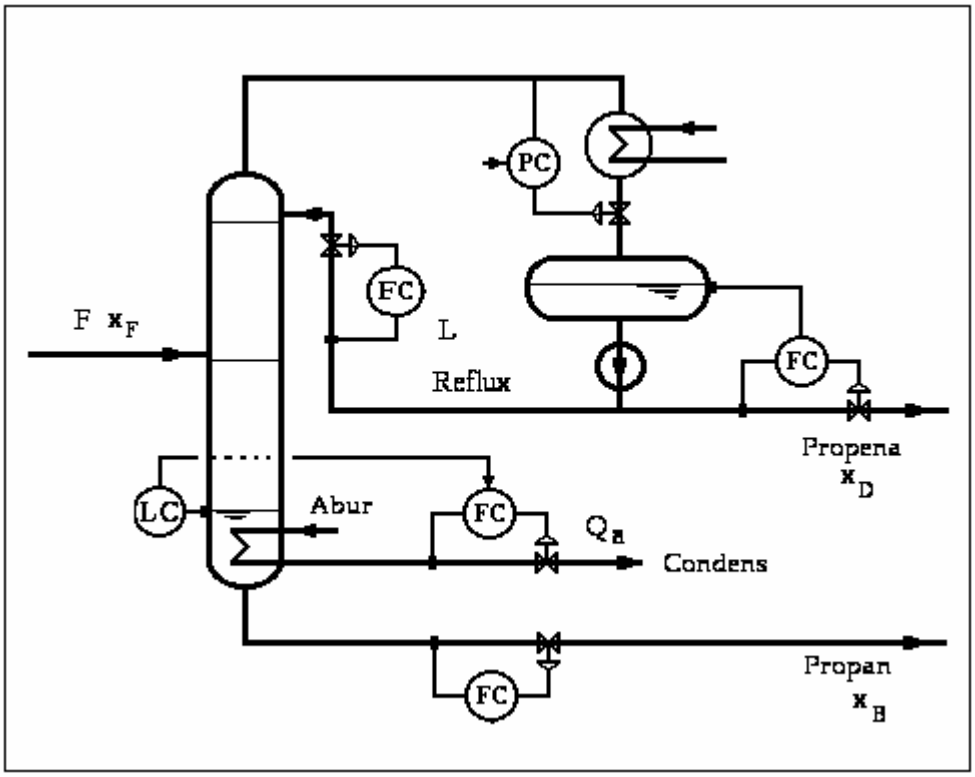


Fig. 3.16. Structura clasică de reglare a coloanei de fracționare propenă-propan.

Se cere să se proiecteze un sistem de reglare optimală a concentrațiilor produselor separate.

Rezolvarea acestei probleme necesită parcurgerea următoarelor etape :

a) Analiza sistemică a procesului;
b) Elaborarea modelului matematic al regulatorului optimal;
c) Simularea numerică a sistemului automat;
d) Elaborarea structurii sistemului de reglare optimală a procesului.

A. *Analiza sistemică a procesului.* Procesul de fracționare din figura 3.16 este caracterizat prin mărimile:

- B şi x_B – debitul şi concentrația în propilenă a reziduului;
- D şi x_D - debitul şi concentrația în propilenă a distilatului;
- F şi x_F – debitul şi concentrația în propilenă a alimentării;
- L – debitul de reflux;

- Q_a – debitul de agent termic la refierbător.

Din punct de vedere al conducerii automate, procesul este caracterizat prin mărimile de ieşire $\boldsymbol{Y}^T = [x_D, x_B]$, perturbațiile $\boldsymbol{P}^T = [F, x_F]$ şi comenzile $\boldsymbol{U}^T = [L, B]$. Schema bloc a procesului este prezentată în figura 3.17.

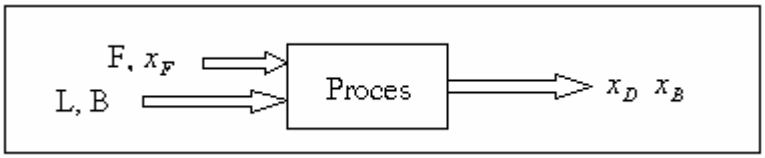


Fig. 3.17. Schema bloc a procesului de fracționare.

B. *Elaborarea modelului matematic al regulatorului optimal.* Specificațiile de calitate asociate celor două produse sunt de tip diferit. Astfel, specificația de calitate a produsului propenă este de *tip rigid*, având valoarea $x_D^i = 0{,}92$, iar specificația de calitate a produsului propan este de *tip elastic*, $x_B^i \in [0{,}01...0{,}20]$.

Pentru a determina valoarea prescrierii optime a specificației de calitate a produsului propan x_B^i, se are în vedere recuperarea cât mai completă a componentului mai valoros (propena) în condițiile unui efort energetic cât mai mic. Această cerință este exprimată prin intermediul funcției obiectiv

$$F_{ob}\left(x_B^i\right) = 10^{-3} M_b \, \Delta p \, B \, x_B^i + c_a Q_a, \qquad (3.84)$$

în care Q_a este debitul de abur, t/h, c_a – costul aburului, lei/t, Δp - diferența dintre prețul distilatului (propena) şi al produsului din bază (propan), lei/t, B – debitul de produs din bază, kmol/h, $M_b = 44$ – masa molară a propanului, kg/kmol.

Primul termen din relația (3.84) este asociat recuperării produsului valoros, iar cel de al doilea defineşte efortul de operare. Valoarea prescrierii x_B^i este obținută prin minimizarea funcției obiectiv (3.84) în condițiile în care comenzile B şi Q_a se supun modelului matematic al regulatorului după perturbație.

Structura regulatorului optimal este prezentată în figura 3.18. Aceasta conține un dispozitiv de optimizare şi un regulator de concentrație cu acțiune după perturbație. Pe baza valorilor perturbațiilor F şi x_F, dispozitivul de optimizare determină valoarea optimă $x_B^{i\,opt}$. Regulatorul cu acțiune după perturbație determină valorile comenzilor procesului, L şi B. Mărimile luate în considerare de către regulatorul cu acțiune după perturbație sunt:

- perturbațiile procesului (debitul F şi concentrația în propenă a alimentării x_F);
- prescrierea x_D^i asociată concentrației în propenă a distilatului ;
- prescrierea optimă $x_B^{i\,opt}$ asociată concentrației în propenă a reziduului.

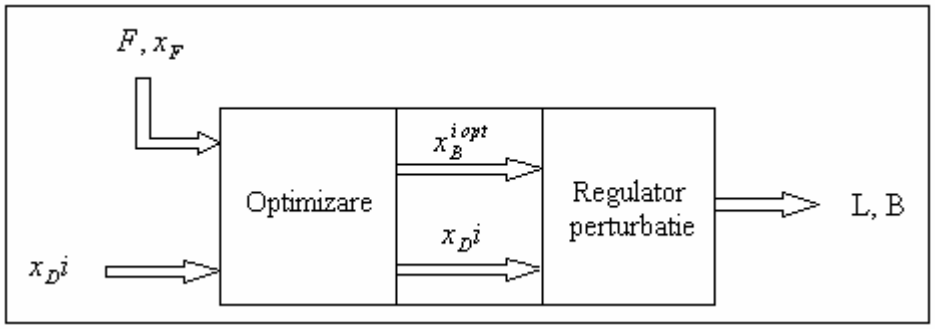


Fig. 3.18. Structura regulatorului optimal.

Modelul matematic al regulatorului de concentrație se bazează pe modelul simplificat al procesului de fracționare Fenske – Gilliland – Underwood şi conține relațiile :

$$B = F\frac{x_D^i - x_F}{x_D^i - x_B^i}, \tag{3.85}$$

$$L = R(F - B), \tag{3.86}$$

$$Q_a = r_D(L + F - B), \tag{3.87}$$

în care

$$R = \frac{A + R_{\min}}{1 - A}, \tag{3.88}$$

$$R_{\min} = \frac{\alpha\, x_D^i}{\alpha - \theta} + \frac{1 - x_D^i}{1 - \theta} - 1. \tag{3.89}$$

$$A = \left(1 - 1{,}333\frac{N - N_{\min}}{N + 1}\right)^{1{,}7587}, \tag{3.90}$$

$$N_{\min}\frac{\ln\left(\frac{x_D^i}{1 - x_D^i} * \frac{1 - x_B^i}{x_B^i}\right)}{\ln\alpha}, \tag{3.91}$$

$$\theta = \frac{\alpha}{x_F(\alpha - 1) + 1}. \tag{3.92}$$

Semnificația mărimilor care intervin în ecuția regulatorului de concentrație sunt :

- α - volatilitatea medie relativă a propenei (componentul uşor) în raport cu propanul (componentul greu);
- θ - parametru în relația Underwood;
- R_{min} - rația minimă de reflux;
- N – numărul teoretic de echilibre lichid – vapori (talere teoretice) ;
- N_{min} – numărul minim de echilibre lichid – vapori (talere teoretice) ;
- R – rația reală de reflux ;
- A – parametru în relația Eduljee ;
- R_D - raportul dintre căldura latentă de vaporizare a propanului şi căldura latentă de condensare a aburului, t/kmol;
- L – debitul de reflux.

C. *Simularea numerică a sistemului automat.* Pentru sistemul descris anterior se consideră: $F = 100\ kmol/h$; $x_F = 0{,}70$; $x_D^i = 0{,}92$; $\alpha = 1{,}147$; $N = 70$; $r_D = 7{,}682\ t/kmol$; $\Delta p = 160000\ lei/t$; $c_a = 20\quad lei/t$.

Pentru a studia caracterul extremal al funcției 3.84 se reprezintă grafic funcția obiectiv în intervalul $x_B^i \in [0{,}01...0{,}20]$, utilizând una din tehnicile descrise în capitolul 1. Pentru exemplul numeric considerat, funcția obiectiv are forma prezentată în figura 3.19. Se poate constata faptul că, în condițiile economice impuse, funcția obiectiv prezintă un minim. Acest fapt confirmă oportunitatea dezvoltării unui sistem de reglare optimală a concentrației produselor separate în coloana de fracționare.

Specificația de calitate de tip rigid a produsului propenă are valoarea $x_D^i = 0{,}92$, iar specificația de calitate de tip elastic a produsului propan este determinată prin minimizarea funcției obiectiv (3.84). Pentru determinarea poziției optimului sunt utilizate comparativ metodele de eliminare prezentate în capitolul 3. Datele inițiale ale problemei de optimizare se găsesc în tabelul 3.3. Au fost utilizați trei algoritmi din clasa metodelor de eliminare : algoritmul Fibonacci, algoritmul secțiunii de aur şi algoritmul perechilor secvențiale. Performanțele celor trei algoritmi sunt exprimate prin: valoarea soluției x^{opt}, valoarea minimă a funcției obiectiv f^{opt}, numărul de iterații şi numărul de evaluări a funcției obiectiv.

Comparând valoarea minimă a funcției obiectiv generată prin reprezentare grafică (100 de puncte de discretizare) cu cea obținută prin minimizare, se constată practic obținerea aceleiaşi valori, respectiv 120901 lei/t. În ceea ce priveşte soluția x^{opt}, există mici diferențe între soluțiile generate de către cei trei algoritmi: 0,08828 - algoritmul Fibonacci, 0,08875 - algoritmul secțiunii de aur şi 0,08877 - algoritmul perechilor secvențiale, tabelul 3.4.

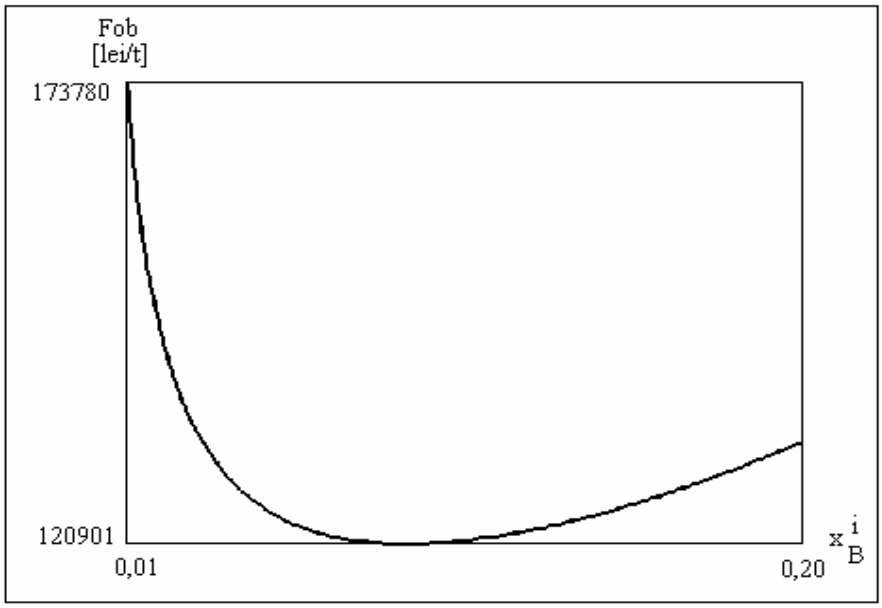


Fig. 3.19. Variația funcției obiectiv (3.80) în raport cu prescrierea x_B^i.

Tabelul 3.3

Datele inițiale utilizate pentru minimizarea funcției (3.83)

Nr. crt.	Parametrul	Valoare
1	$x_{\min}$ - limita inferioară a intervalului de localizare a optimului	0,01
2	$x_{\max}$ - limita superioară a intervalului de localizare a optimului	0,20
3	ε - precizia impusă pentru determinarea optimului	0,001
4	nmax – numărul de iterații maxim admis	50

Tabelul 3.4

Rezultatele obținute la minimizarea funcției (3.83)

Parametrul	Algoritm		
	Fibonacci	Secțiunea de aur	Perechi secvențiale
x^{opt}	8.8283261E-02	8.8757481E-02	8.8778940E-02
f^{opt}	1.2090192E+05	1.2090173E+05	1.2090174E+05
Iterații	11	11	10
Număr evaluări	12	12	21

În ceea ce privește eficiența, algoritmul Fibonacci şi algoritmul secțiunii de aur sunt mult mai performanți în raport cu algoritmul perechilor secvențiale. Criteriul complexității calculelor situează algoritmul Fibonacci

pe primul loc şi în consecinţă, în cadrul regulatorului optimal de concentraţie se va utiliza algoritmul secţiunii de aur.

D. *Elaborarea structurii sistemului de reglare optimală a procesului.*

Sistemul de reglare optimală a procesului de fracţionare propilenă - propan este structurat pe două niveluri, figura 3.20 :

1. La nivelul 1 se găsesc sistemele de măsurare şi reglare automată a parametrilor procesului (debit, presiune, nivel, concentraţie). Aceste sisteme pot fi realizate atât cu echipamente analogice cât şi numerice.
2. Nivelul 2 de automatizare conţine regulatorul optimal de concentraţie. Acesta este realizat fizic numai cu echipament numeric. În funcţie de natura echipamentelor situate la nivelul 1 de automatizare, regulatorul optimal poate conţine subsisteme de conversie analog – numerică a semnalelor de intrare şi subsisteme numeric – analog a comenzilor generate. O altă situaţie poate fi întâlnită în cazul în care dispozitivele de la nivelul 1 de automatizare pot transmite şi recepţiona semnale numerice, folosind linii de comunicaţie serială de tipul RS485.

Perioada de eşantionare a regulatorului optimal de concentraţie este de ordinul a 30...60 minute, cu mult mai mare decât perioada de eşantionare asociată sistemelor de reglare a parametrilor din cadrul nivelului 1 de automatizare.

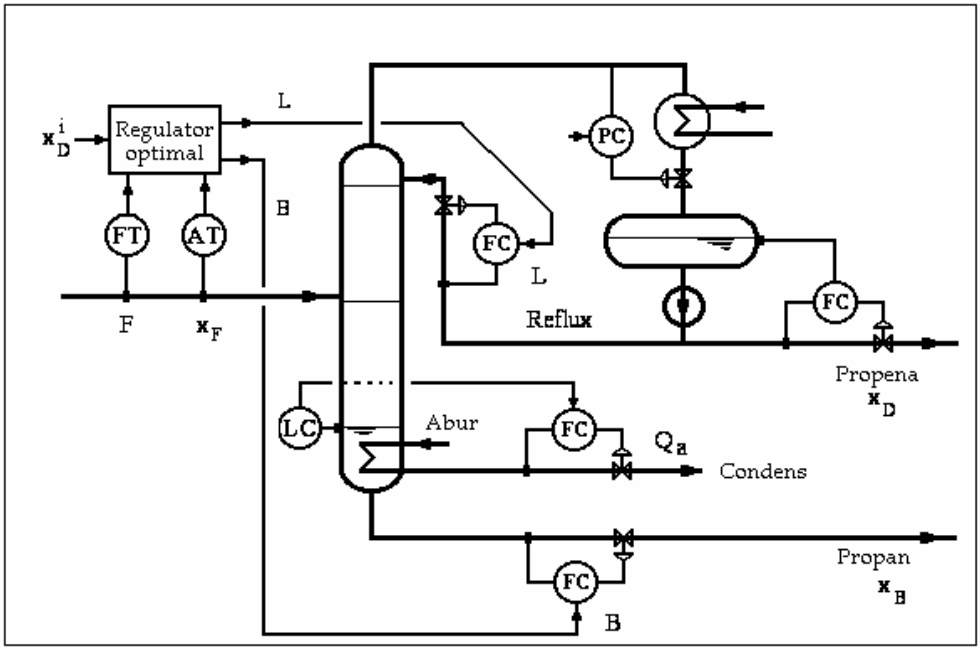


Fig. 3.20. Structura sistemului de reglare optimală a coloanei de fracţionare

3.3. Metode de interpolare

Pentru o serie de funcții obiectiv monovariabile este necesară utilizarea unor metode de optimizare ce asigură o convergență sporită în raport cu metodele de eliminare. Creşterea performanțelor algoritmilor poate fi realizată dacă în locul funcției obiectiv $f(x)$ se utilizează o aproximată a acesteia, $g(x)$, a cărui optim analitic este cunoscut.

3.3.1. Principiul metodelor de interpolare.

Se consideră o funcție monovariabilă, unimodală, $f(x)$, funcție ce prezintă un punct de minim. Pe domeniul $[x_1, x_3]$, $f(x)$ se poate aproxima cu funcția polinomială $g(x)$, figura 3.18

$$g(x) = a\,x^2 + b\,x + c \tag{3.92}$$

al cărei minim este dat de relația analitică

$$x^{opt} = -\frac{b}{2a}. \tag{3.93}$$

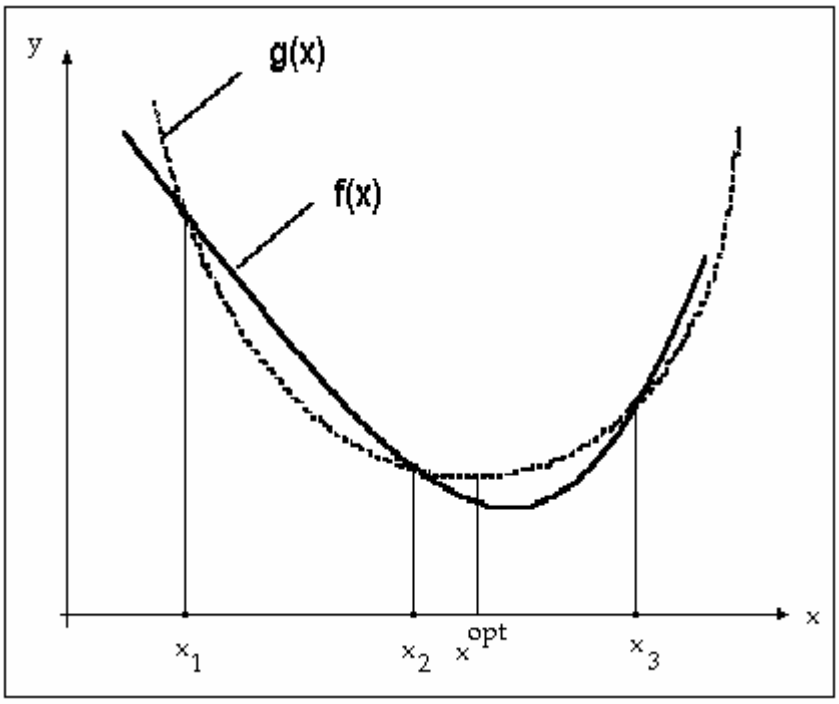


Fig. 3.18. Principiul metodelor de interpolare.

Coeficienții *a*, *b* şi *c* ai funcției de aproximare $g(x)$ sunt determinați din condiția

$$\begin{cases} f(x_1) = ax_1^2 + bx_1 + c \\ f(x_2) = ax_2^2 + bx_2 + c \\ f(x_3) = ax_3^2 + bx_3 + c \end{cases} \tag{3.94}$$

a cărei soluție este

$$\begin{cases} a = \dfrac{(x_2 - x_3)f(x_1) + (x_3 - x_1)f(x_2) + (x_1 - x_2)f(x_3)}{(x_3 - x_1)(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} \\ b = \dfrac{f(x_1)(x_3^2 - x_2^2) + f(x_2)(x_1^2 - x_3^2) + f(x_3)(x_2^2 - x_1^2)}{(x_3 - x_1)(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} \end{cases} \tag{3.95}$$

<u>*Demonstrație.*</u> Principalele etape de soluționare a sistemului (3.94) sunt:

$$\begin{cases} f(x_2) - f(x_1) = a\left[x_2^2 - x_1^2\right] + b\left[x_2 - x_1\right] \\ f(x_3) - f(x_1) = a\left[x_3^2 - x_1^2\right] + b\left[x_3 - x_1\right] \end{cases},$$

$$f(x_2) - f(x_1) - [f(x_3) - f(x_1)] * \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1} =$$

$$= a[x_2^2 - x_1^2] - a[x_3^2 - x_1^2] * \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1};$$

$$a = \frac{\dfrac{x_2 - x_3}{x_3 - x_1} f(x_1) + f(x_2) - \dfrac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1} f(x_3)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)};$$

$$a = \frac{(x_2 - x_3)f(x_1) + (x_3 - x_1)f(x_2) + (x_1 - x_2)f(x_3)}{(x_3 - x_1)(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)}; \tag{3.96}$$

$$b = \frac{f(x_2) - f(x_1) - a[x_2^2 - x_1^2]}{x_2 - x_1};$$

$$b = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - a(x_1 + x_2);$$

$$b = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - (x_1 + x_2) * \frac{(x_2 - x_3)f(x_1) + (x_3 - x_1)f(x_2) + (x_1 - x_2)f(x_3)}{(x_3 - x_1)(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)}$$

$$b = \frac{f(x_1)(x_3^2 - x_2^2) + f(x_2)(x_1^2 - x_3^2) + f(x_3)(x_2^2 - x_1^2)}{(x_3 - x_1)(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)}. \qquad (3.97)$$

Utilizând (3.96) şi (3.97), poziția punctului de optim va fi

$$x^{opt} = -\frac{\dfrac{f(x_1)(x_3^2 - x_2^2) + f(x_2)(x_1^2 - x_3^2) + f(x_3)(x_2^2 - x_1^2)}{(x_3 - x_1)(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)}}{2*\dfrac{(x_2 - x_3)f(x_1) + (x_3 - x_1)f(x_2) + (x_1 - x_2)f(x_3)}{(x_3 - x_1)(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)}},$$

respectiv

$$x^{opt} = \frac{f(x_1)(x_3^2 - x_2^2) + f(x_2)(x_1^2 - x_3^2) + f(x_3)(x_2^2 - x_1^2)}{2*\left[(x_3 - x_2)f(x_1) + (x_1 - x_3)f(x_2) + (x_2 - x_1)f(x_3)\right]}. \qquad (3.98)$$

<u>*Caz particular.*</u> Dacă în sistemul (3.94) se impune ca punctele să fie echidistante

$$x_3 - x_2 = x_2 - x_1 = \Delta x \qquad (3.99)$$

soluția sistemului devine

$$\begin{cases} a = \dfrac{f(x_1) - 2f(x_2) + f(x_3)}{2\Delta x^2} \\ b = x_2 \dfrac{2f(x_2) - f(x_1) - f(x_3)}{\Delta x^2} + \dfrac{f(x_3) - f(x_1)}{2\Delta x} \end{cases} \qquad (3.100)$$

<u>*Demonstrație.*</u> Principalele etape de soluționare a sistemului sunt:

$$a = \frac{-\Delta x\, f(x_1) + 2\Delta x\, f(x_2) - \Delta x\, f(x_3)}{-2\Delta x \cdot \Delta x \cdot \Delta x};$$

$$a = \frac{f(x_1) - 2f(x_2) + f(x_3)}{2\Delta x^2}; \qquad (3.101)$$

$$b = \frac{f(x_1) \cdot \Delta x(x_3 + x_2) - f(x_2)(x_1 + x_3) \cdot 2\Delta x(x_2 + x_1)}{-2\Delta x \cdot \Delta x \cdot \Delta x};$$

$$b = \frac{(x_3 + x_2)f(x_1) - 2(x_1 + x_3)f(x_2) + (x_1 + x_2)f(x_3)}{-2\Delta x^2};$$

$$b = \frac{(x_2 + x_2 + \Delta x)f(x_1) - 2(x_2 - \Delta x + x_2 + \Delta x)f(x_2) + (x_2 - \Delta x + x_2)f(x_3)}{-2\Delta x^2}$$

$$b = \frac{(2x_2 + \Delta x) f(x_1) - 4x_2 \; f(x_2) + (2x_2 - \Delta x) f(x_3)}{-2\Delta x^2};$$

$$b = \frac{2x_2 \; f(x_1) + \Delta x \; f(x_1) - 4x_2 \; f(x_2) + 2x_2 \; f(x_3) - \Delta x \; f(x_3)}{-2\Delta x^2};$$

$$b = \frac{x_2 \left[2 f(x_1) - 4 f(x_2) + 2 f(x_3)\right] + \Delta x \left(f(x_1) - f(x_3)\right)}{-2\Delta x^2};$$

$$b = x_2 \frac{2f(x_2) - f(x_1) - f(x_3)}{\Delta x^2} + \frac{f(x_3) - f(x_1)}{2\Delta x}. \qquad (3.102)$$

Utilizând coeficienții a şi b din soluția (3.100), poziția optimului asociat parabolei devine succesiv

$$x^{opt} = -\frac{b}{2a} = -\frac{1}{2} \frac{x_2 \dfrac{2f(x_2) - f(x_1) - f(x_2)}{\Delta x^2} + \dfrac{f(x_3) - f(x_1)}{2\Delta x}}{\dfrac{f(x_1) - 2f(x_2) + f(x_3)}{2\Delta x^2}};$$

$$x^{opt} = -\frac{1}{2}\left[\frac{2x_2\left[2f(x_2) - f(x_1) - f(x_2)\right] + \Delta x\left[f(x_3) - f(x_1)\right]}{f(x_1) - 2f(x_2) - f(x_3)}\right];$$

respectiv

$$x^{opt} = x_2 - \Delta x \frac{f(x_3) - f(x_1)}{2\left[f(x_1) - 2f(x_2) + f(x_3)\right]}. \qquad (3.103)$$

3.3.2. Algoritmi din clasa metodelor de interpolare.

Pe baza principului metodelor de interpolare şi a rezultatului (3.98) a fost realizat algoritmul de explorare unidimensională *Powell* iar relația (3.103) a fost utilizată de algoritmul *Davies, Swann şi Campey* .

Algoritmul Powell. Algoritmul de minimizare prin interpolare propus de Powell este structurat în două etape:

a) etapa încadrării optimului;
b) etapa interpolării pătratice.

Etapa încadrării optimului reprezintă o etapă obligatorie în cadrul algoritmilor de minimizare prin interpolare, deoarece dacă funcția de

aproximare $g(x)$ nu încadrează optimul funcției $f(x)$ algoritmul nu este convergent.

În esență, etapa încadrării optimului este un mecanism de explorare unidimensională, caracterizat prin ajustarea pasului de căutare. Această etapă conține următorii paşi:

a) testul pasului de explorare;
b) explorarea unidimensională şi testul încadrării optimului;
c) comprimarea intervalului care conține optimul.

Testul pasului de explorare se derulează astfel:

a) Se consideră un punct inițial x_0 şi un pas de explorare inițial (sau de bază) $\Delta x^{(0)}$;
b) Se evaluează funcția în punctul x_0, $f_0 = f(x_0)$;
c) Se calculează coordonata $x_1 = x_0 + \Delta x^{(0)}$, se evaluează funcția în acest punct, $f_1 = f(x_1)$;
d) Pasul de explorare este considerat bine ales dacă valoarea funcției obiectiv scade, respectiv $f_1 < f_0$. În caz contrar se schimbă sensul pasului de explorare, $\Delta x^{(0)} = -\Delta x^{(0)}$.

Sintetic, testul pasului de explorare se poate formula astfel:

$$\Delta x^{(0)} = \begin{cases} \Delta x^{(0)}, & f_1 < f_0 \\ -\Delta x^{(0)}, & f_1 \geq f_0 \end{cases} \tag{3.104}$$

Explorarea unidimensională constă în modificarea coordonatei x a punctului curent conform relației

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \Delta x^{(k-1)} \tag{3.105}$$

unde $x^{(k)}$ reprezintă coordonata x în iterația k, $x^{(k-1)}$ - coordonata x în iterația *k-1*, $\Delta x^{(k-1)}$ este pasul de explorare calculat în iterația *k-1*.

Pasul de explorare este dublat succesiv, până la depăşirea punctului de optim

$$\Delta x^{(k)} = 2 * \Delta x^{(k-1)} \quad \text{dacă} \quad f\left(x^{(k)}\right) \leq f\left(x^{(k-1)}\right). \tag{3.106}$$

Testul încadrării optimului se referă la determinarea coordonatelor punctului care este situat imediat după extrem. Se consideră că punctul $x^{(k)}$ încadrează optimul dacă

$$f\left(x^{(k)}\right) > f\left(x^{(k-1)}\right). \tag{3.107}$$

În cazul în care relația (3.106) este îndeplinită, optimul funcției $f(x)$ satisface relația

$$x^{(k-2)} < x_{opt} < x^{(k)} \ . \tag{3.108}$$

Comprimarea intervalului care conține optimul reprezintă operația prin care intervalul ce conține optimul, $\left[x^{(k-2)}, x^{(k)}\right]$, este micşorat succesiv, până când

$$\left|x^{(k)} - x^{(k-2)}\right| = 3 * \Delta x^{(0)}. \tag{3.109}$$

Această operație este realizată prin reluarea explorării unidimensionale, considerând ca punct inițial $x^{(0)}$ punctul de coordonate $x^{(k-2)}$ şi pasul de explorare inițial, $\Delta x^{(0)}$. Comprimarea intervalului care conține optimul este justificată printr-o încadrare mai bună a optimului şi implicit creşterea preciziei în determinarea optimului.

Etapa interpolării pătratice constă dintr-o continuă succesiune de interpolări şi extrapolări cu ajutorul a trei puncte, dintre care unul este periodic înlocuit. După parcurgerea etapei de încadrare a optimului se obțin, în iterația k asociată acestei etape, trei puncte.

Introducând sistemul de notații

$$\begin{cases} x_1 = x^{(k-2)}; & f_1 = f\left(x^{(k-2)}\right) \\ x_2 = x^{(k-1)}; & f_2 = f\left(x^{(k-1)}\right) \\ x_3 = x^{(k)}; & f_3 = f\left(x^{(k)}\right) \end{cases}, \tag{3.110}$$

după iterația k se obțin punctele $(x_1, f_1), (x_2, f_2), (x_3, f_3)$, situate la distanțele $\Delta x^{(0)}$, respectiv $2\Delta x^{(0)}$ de punctul (x_1, f_1).

Etapa interpolării pătratice conține următorii paşi:

a) interpolarea pătratică;
b) determinarea coordonatei x_{min}, asociată punctului corespunzător celei mai mici valori a funcției $f(x)$;
c) aplicarea criteriului de stop;
d) înlocuirea punctului defavorabil.

Interpolarea pătratică decurge conform relației (3.98), determinându-se coordonata x^{opt}, coordonata vârfului parabolei ce trece prin punctele $(x_1, f_1), (x_2, f_2), (x_3, f_3)$

$$x^{opt} = \frac{f(x_1)(x_3^2 - x_2^2) + f(x_2)(x_1^2 - x_3^2) + f(x_3)(x_2^2 - x_1^2)}{2 * \left[(x_3 - x_2) f(x_1) + (x_1 - x_3) f(x_2) + (x_2 - x_1) f(x_3)\right]}.$$

Determinarea coordonatei punctului cu valoare minimă asociat funcției f(x) reprezintă determinarea punctului x_{min}, caracterizat prin

$$x_{\min} = \{x_1, x_2, x_3 \ / \ f(x) = \min\}. \tag{3.111}$$

Criteriul de stop este reprezentat de relația

$$\left| x_{opt} - x_{\min} \right| \le \varepsilon \tag{3.112}$$

în care ε este o limită de precizie impusă.

Minimul x_E al funcției obiectiv este considerat x^{opt} sau x_{min}, corespunzător valorilor $f\left(x^{opt}\right)$, respectiv $f(x_{\min})$

$$x_E = \begin{cases} x_{opt}, & f\left(x_{opt}\right) < f(x_{\min}) \\ x_{\min}, & f\left(x_{opt}\right) \ge f(x_{\min}) \end{cases}. \tag{3.113}$$

În caz contrar, se procedează la înlocuirea punctului defavorabil.

Punctul defavorabil reprezintă acel punct de coordonate $(x, f(x))$, care poate fi eliminat din cvadrupulul $(x_1, f_1), (x_2, f_2), (x_{opt}, f_{opt}), (x_3, f_3)$. În funcție de poziția relativă a punctelor x^{opt} şi x_2, pot fi întâlnite situațiile prezentate în tabelul 3.3. O imagine sugestivă este prezentată în figura 3.19.

Tabelul 3.3

Poziția punctului defavorabil şi relațiile de translatare

Nr. crt.	Condiția matematică	Punctul defavorabil	Relațiile de translatare
1	$x_1 < x_{opt} < x_2$ şi $f_1 > f_{opt} > f_2$	(x_1, f_1)	$x_1 = x^{opt}$; $f_1 = f_{opt}$
2	$x_1 < x_{opt} < x_2$ şi $f_1 > f_{opt} < f_2$	(x_3, f_3)	$x_3 = x_2$; $f_3 = f_2$ şi $x_2 = x^{opt}$; $f_2 = f_{opt}$
3	$x_2 < x_{opt} < x_3$ şi $f_2 < f_{opt} < f_3$	(x_3, f_3)	$x_3 = x^{opt}$; $f_3 = f_{opt}$
4	$x_2 < x_{opt} < x_3$ şi $f_2 < f_{opt} < f_3$	(x_1, f_1)	$x_1 = x_2$; $f_1 = f_2$ şi $x_2 = x_{opt}$; $f_2 = f_{opt}$

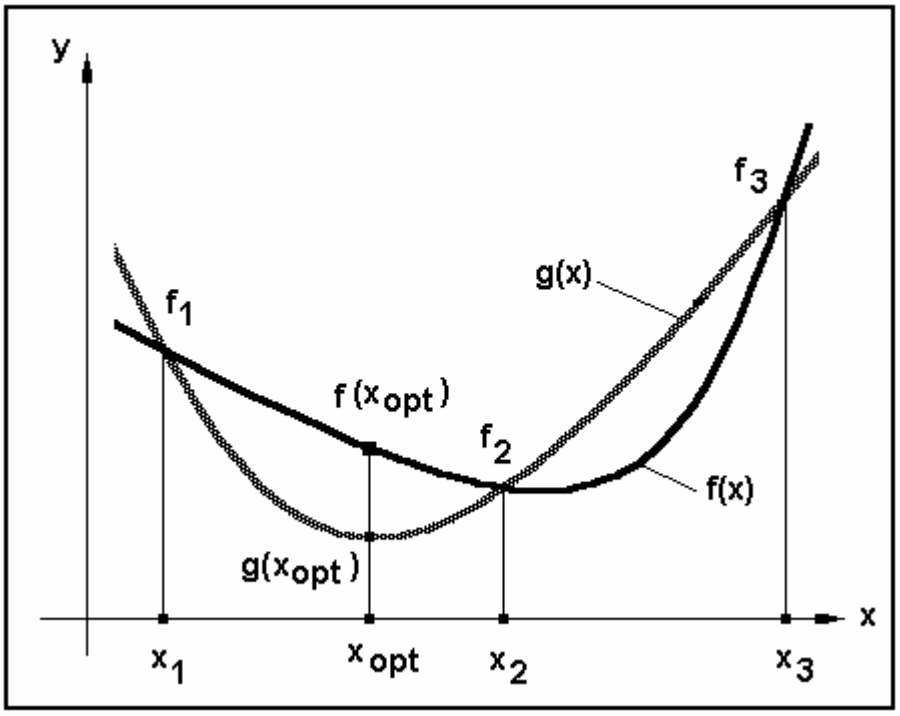


Fig. 3.19. Reprezentarea grafică a punctului defavorabil în situația 1, tabelul 3.3.

3.4. Probleme şi întrebări

1. Să se dezvolte schema logică pentru algoritmul determinării valorii optime şi a poziției acesteia într-un şir de valori.
2. Care sunt etapele algoritmului de determinare a optimului unei funcții monovariabile pe baza minimului unui şir ?
3. Care sunt relațiile de calcul utilizate de algoritmul de determinare a optimului unei funcții monovariabile prin explorarea funcției ?
4. Care este principiul metodelor de eliminare ?
5. Care sunt relațiile de calcul utilizate în cadrul algoritmului perechilor secvențiale ?
6. Generați o schemă logică pentru algoritmul perechilor secvențiale.

7. Care este condiția de oprire a calculelor din cadrul algoritmului perechilor secvențiale ?
8. Ce reprezintă şirul lui Fobonacci şi cum este utilizat în cadrul algoritmului de minimizare ?
9. Care sunt ipotezele din cadrul algoritmului Fibonacci ?
10. Care sunt relațiile de calcul pentru determinarea punctelor intermediare x_1^j şi x_2^j din cadrul algoritmului Fibonacci ?
11. Care este condiția de oprire a calculelor din cadrul algoritmului Fibonacci ?
12. Cum este calculat numărul total de iterații pentru algoritmul Fibonacci ?
13. Ce probleme numerice apar în etapa de calcul a elementelor şirului Fibonacci ?
14. Care sunt ipotezele din cadrul algoritmului secțiunii de aur ?
15. Ce reprezintă secțiunea de aur ?
16. Care sunt relațiile de calcul pentru determinarea punctelor intermediare x_1^j şi x_2^j din cadrul algoritmului secțiunii de aur ?
17. Care este condiția de oprire a calculelor din cadrul algoritmului secțiunii de aur ?
18. Care sunt asemănările şi deosebirile între algoritmii: perechi secvențiale, Fibonacci, secțiunea de aur ?
19. Care este principiul metodelor de interpolare ?
20. Care sunt etapele algoritmului Powell ?
21. Care sunt paşii algoritmului Powell în etapa încadrării optimului ?
22. Care sunt paşii algoritmului Powell în etapa interpolării pătratice ?
23. Ce reprezintă un punct defavorabil ?
24. Care este condiția de oprire a calculelor din cadrul algoritmului Powell ?