

Részletes szakmai zárójelentés

Nemlineáris rendszerek analízise és diagnosztikája mérnöki elvekre épülő modellekkel (Model-based analysis and diagnosis of nonlinear systems using first principles)

A pályázatban modell alapú módszereket alkalmaztunk a nemlineáris rendszerek dinamikus analízise és diagnosztikája területén felmerülő kutatási problémák megoldására a termodinamika, a mérnöki tudományok, valamint a rendszer- és irányításmélet módszereinek és eszközeinek integrálásával. Kifejlesztett módszereink a dinamikus állapotter modellek mérnöki elvek meghatározta struktúráját derítik fel és hasznosítják.

Célkitűzéseink

Kutatásaink általános célja, hogy a nemlineáris rendszerek minél szélesebb osztályaira olyan dinamikus analízis, szabályozótervezési és diagnosztikai módszereket dolgozzunk ki, amelyek a rendszerek fizikai és kémiai sajátosságaiból eredő speciális struktúráját használják ki. Ha a diagnosztizálandó vagy irányítandó rendszer dinamikus modellje megmaradási egyenletekből származtatható, akkor ezt a speciális struktúrát hatékonyan alkalmazhatjuk irányításméleti algoritmusok modell alapú tervezésére.

Az elvégzett kutatómunkát a következő témakörök köré csoportosítottuk.

1. Pozitív nemlineáris rendszerek fizikailag értelmes realizációi és ezek használata stabilitás analízisre
2. Optimalizáción alapuló nemlineáris paraméterbecslés
3. Nemlineáris rendszerek kvalitatív modell alapú diagnosztikája

Az alábbiakban a fenti témakörökben elért *legfontosabb eredményeinket* ismertetjük röviden.

1. Pozitív nemlineáris rendszerek fizikailag értelmes realizációi és ezek használata stabilitás analízisre

A pozitív (precízen nem-negatív) rendszereket az jellemzi, hogy állapotváltozóik értéke a dinamika során mindig pozitív marad, ha a kezdeti állapotokat is pozitívnak választjuk. A pozitív rendszerek számos alkalmazási területen játszanak meghatározó szerepet, például kémiai, ökológiai, közgazdasági, populációdinamikai vagy közlekedési rendszerekben [5]. Két nevezetes pozitív nemlineáris rendszerosztályt vizsgáltunk, amelyek sima nemlinearitásokkal rendelkező dinamikák leírására alkalmasak: a kémiai reakcióhálózatok (Chemical Reaction Networks (CRNs)) és a kvázipolinom (QP) rendszerek osztályát.

A kémiai reakcióhálózatok a pozitív rendszerek egy széles osztályát képezik, amelyet nemcsak kémikusok, hanem fizikusok és alkalmazott matematikusok is nagy érdeklődéssel vizsgálnak [4, 2]. A kvázipolinom rendszerek osztálya egy ezzel rokon, részben átlapoló rendszerosztály, amelybe a legtöbb, sima nemlinearitással rendelkező modell beágyazható [13].

A legfontosabb eredmények:

- **Sima nemlinearitású rendszerek reprezentálása reakciókinetikai rendszerekként**

Az állapotter dinamikus hasonlóságát biztosító X-factorable transzformáció alkalmazásával megmutattuk, hogy a pozitív polinomiális rendszerek általános leírására használható kvázipolinom (QP), valamint a tömeghatás kinetikájú reakció hálózatokat leíró modellek strukturális dinamikus hasonlósága az ezen rendszerekhez konstruálható rejtett (underlying) lineáris dinamikus rendszerek segítségével állapítható meg [9]. Ezt a megfeleltetést használtuk a későbbiekben sima nemlinearitású rendszerek modelljeinek strukturális dinamikus hasonló reakcióhálózati modell formájában való felírására.

- **Reakciókinetikai rendszerek optimális realizációi**

Szerteágazó és eredményes vizsgálatokat folytattunk adott dinamikájú tömeghatás kinetikájú kémiai reakcióhálózatok adott dinamikus tulajdonságú (pl. pozitív egyensúlyi ponttal bíró, stabilis stb) realizációinak meghatározására szolgáló hatékony algoritmusok kifejlesztésének céljából. Hatékony (LP-alapú) gyengén reverzibilis realizáció-kereső algoritmust is kifejlesztettünk nagyméretű

biokémiai hálózatokra [18]. Sikerült hatékony algoritmust találnunk nullás deficienciájú gyengén reverzibilis realizációk előállítására is [17].

- **Stabilitás és struktúrális stabilitás analízis**

A folyamatrendszerek megmaradás alapú modelljeinek struktúráját felhasználva hierarchikusan decentralizált szabályozó struktúrát dolgoztunk ki ezen nemlineáris rendszerosztály stabilizáló visszacsatolással történő szabályozására. A módszer a hierarchikusan dekomponált modell struktúrális stabilitás analízisének eredményére épül [10].

A rejtett lineáris dinamikus modell tulajdonságait, valamint a Markov láncokra definiált szinthatlmaz-ekvivalens entrópia függvények elméletét felhasználva sikerült megállapítani a reakciókinetikai és a kvázipolinom rendszerekhez használatos kicsit különböző alakú logaritmikus Lyapunov függvények ekvivalenciáját [10]. Ez a további, kontroll-Lyapunov függvényen alapuló szabályozótervezési módszerek alapja lehet.

2. Optimalizáción alapuló nemlineáris paraméterbecslés

A nemlineáris rendszerek paramétereinek becslésére a paraméterekben nemlineáris esetben általában olyan módszereket használnak, amely a becslés eredményét egy alkalmasan megfogalmazott és numerikusan megoldott optimalizálási feladat megoldásaként szolgáltatja. A vizsgált rendszer fizikai tulajdonságai által biztosított speciális struktúrája sok esetben megkönnyíti az optimalizálási feladat megoldását oly módon, hogy az egy adott könnyű (pl konvex) optimalizálási feladat-osztályba esik.

A legfontosabb eredmények:

- **Véges dimenziós kvantum rendszerek paramétereinek becslése és kísérlettervezés**

Konvex optimalizáláson, valamint valószínűségszámítási megközelítésen alapuló módszereket dolgoztunk ki véges állapotú kvantumrendszerek Pauli csatornái paramétereinek becslésére, valamint az optimális kísérleti körülmények meghatározására (kísérlettervezés) von Neumann mérések alkalmazása esetén [1], [19].

- **Hibrid nemlineáris rendszerek paramétereinek becslése**

Ezen a részműn belül energetikai, speciálisan megújuló energiaforrásokat is tartalmazó villamos energetikai alkalmazások számára fejlesztettünk ki speciális módszereket. Módszert dolgoztunk ki ipari generátorok minimális és identifikálható modellezésére, valamint kifejlesztettünk egy, ezen modellek paramétereinek becslésére alkalmas paraméterbecslési eljárást, amely passzív mérésekkel is képes elfogadható becslést adni [6]. Kidolgoztuk a kifestültségű villamos hálózatokban lévő felharmonikus torzítás on-line becslésének módszerét, és ezen alapulva adaptív szabályozót terveztünk a torzítás csökkentésére szinkron-invertereket felhasználva [7].

- **Biokémiai és bioelektromos rendszerek paramétereinek becslése**

Megvizsgáltuk a sejtmembránban található ioncsatornák Hodgkin-Huxley típusú modelljeinek identifikálhatóságát, és optimalizáláson, valamint heurisztikus elemeken is alapuló modell paraméter becslési eljárásokat dolgoztunk ki a paraméterek becslésére [3].

Vizsgáltuk a kémiai reakcióhálózatok modelljeinek egyszerűsítésére alkalmas módszereket is, és kvadratikus optimalizáláson alapuló módszert dolgoztunk ki olyan egyszerűbb, azaz kevesebb egyenletet tartalmazó modellek meghatározására, amelyek dinamikus viselkedése az eredeti modell viselkedésétől csak egy adott kis mértékben tér el [12].

3. Nemlineáris rendszerek kvalitatív modell alapú diagnosztikája

Nagyméretű, komplex rendszereknél általában nem áll rendelkezésre elegendően pontos, részletes matematikai modell, ami a diagnosztika alapját képezhetné. Így diagnosztikai célra egymással részlegesen átfedő különböző információs forrásokat lehet és kell is felhasználni. Ezen információs források egyike a rendszer meghibásodás és működőképességének analízise során nyert adatok, amelyek standard HAZOP (hazard and operability analysis [16]) vagy FMEA (fault mode and effect analysis [15]) formában áll rendelkezésre.

Ezek az információk kvalitatív jellegűek, ezért formális leírásukra az időzített színes Petri hálókat használhatjuk [8] az egyéb kvalitatív leírási formákkal ötvözve [22].

A legfontosabb eredmények:

- A megbízhatósági analízis ismert módszereinek (HAZOP és FMEA) integrálásával egy olyan, számítógéppel segített megbízhatósági analízis módszertant hoztunk létre, amelynek eredményei diagnosztikai célra is alkalmazhatóak [20]. A módszert kiterjesztettük az időfüggő, operátori eljárásokkal vezérelt esetre is.

A nagyméretű komplex rendszerek modell alapú diagnosztikáját hatékonyan elvégezni képes módszert fejlesztettünk ki, amely a rendszer fizikailag értelmes dekompozícióján alapul és a megbízhatósági analízis ismert módszereinek (HAZOP és FMEA) integrálásával létrehozott és az időfüggő esetre általánosított adatrendszert használ [21].

Az eredményekből született közlemények és tudományos fokozatok

- Az eredményeket az alábbi összesítő táblázatban bemutatott módon publikáltuk:

Közlemény típusa	Darabszám	Impakt faktor összes
folyóiratcikk	24	39.647
disszertáció	5	0
konf. közlemény	20	0
könyvfejezet	7	0
Összesen	56	39.647

- Az eredményekből a projekt résztvevői által elkészített és megvédett PhD értekezések
 1. Rozgonyi Szabolcs: Stability Analysis and Control of Hybrid Systems, PhD Dissertation, University of Pannonia, Hungary, 2012
 2. Görbe Péter: Áram minőség optimalizálása kisfeszültség? nemlineáris torzított hálózatokban megújuló energiaforrások komplex integrációjával, Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Kar Informatikai Tudományok Doktori Iskola, 2013
 3. Balló Gábor: Parameter estimation and robustness analysis of quantum information systems, PhD Thesis, Pannon Egyetem, Informatikai Tudományok Doktori Iskola, 2014
 4. Rudan János: Optimization-based analysis and control of complex networks with nonlinear dynamics, PhD értekezés, Pázmány Péter Katolikus Egyetem Információs Technológiai és Biológiai Kar, 2014
 5. Fodor Attila: Model parameter estimation and control of a synchronous generator, PhD dissertation, Pannon Egyetem, Informatikai Tudományok Doktori Iskola, 2015

Hivatkozások

- [1] Balló, G., Hangos, K.M.: Convex Optimization-Based Parameter Estimation and Experiment Design for Pauli Channels, *IEEE TRANSACTIONS ON AUTOMATIC CONTROL* (ISSN: 0018-9286) 57: (8) pp. 2056-2061, 2012
- [2] Chellaboina, V., Bhat, S.P., Haddad, W.M., Bernstein, D.S. (2009) Modeling and Analysis of Mass-Action Kinetics – Nonnegativity, Realizability, Reducibility, and Semistability. *IEEE Control Systems Magazine* 29 pp. 60–78
- [3] Csercsik, D; K M Hangos, G Szederkényi: Identifiability analysis and parameter estimation of a single Hodgkin-Huxley type voltage dependent ion channel under voltage step measurement conditions, *NEUROCOMPUTING* 77: pp. 178-188, 2012
- [4] Érdi, P., Tóth, J. (1989) *Mathematical Models of Chemical Reactions. Theory and Applications of Deterministic and Stochastic Models*. Manchester University Press, Princeton University Press, Manchester, Princeton
- [5] Farina, L., Rinaldi, S. (2000) *Positive Linear Systems: Theory and Applications*. Wiley
- [6] Fodor A, Magyar A, Hangos K M: Control-oriented modeling of the energy-production of a synchronous generator in a nuclear power plant, *ENERGY* 39:(1) pp. 135-145, 2012
- [7] Görbe P; Magyar A, Hangos K: Reduction of power losses with smart grids fuelled with renewable sources and applying EV batteries, *JOURNAL OF CLEANER PRODUCTION* 34:(1) pp. 125-137, 2012
- [8] Hangos, K.M., Lakner, R., Gerzson, M. (2001) *Intelligent Control Systems: An Introduction with Examples*. Kluwer Academic Publisher, New York
- [9] Hangos, K.M., G.Szederkényi: The underlying linear dynamics of some positive polynomial systems, *PHYSICS LETTERS A* (ISSN: 0375-9601) 376: (45) pp. 3129-3134, 2012
- [10] Hangos K M, Szederkényi G: A model structure-driven hierarchical decentralized stabilizing control structure for process networks, *J PROCESS CONTR* 24: (9) 1358-1370, 2014
- [11] Hangos, KM, A Magyar, G Szederkényi: Entropy-inspired Lyapunov Functions and Linear First Integrals for Positive Polynomial Systems, *MATH MODEL NAT PHENO* 10: (3) 105-123, 2015
- [12] Hannemann-Tamás, R., Gábor, A., Szederkényi, G., Hangos, K.M.: Model complexity reduction of chemical reaction networks using mixed-integer quadratic programming, *COMPUTERS AND MATHEMATICS WITH APPLICATIONS* (ISSN: 0898-1221) 65: (10) pp. 1575-1595, 2013
- [13] Hernandez-Bermejo, B., Fairen, V. (1995) Nonpolynomial vector fields under the Lotka-Volterra normal form *Physics Letters A*, 206 pp. 31–37
- [14] Jensen, K. (1997) *Coloured Petri Nets. Basic Concepts, Analysis Methods and Practical Use. Volume 1, Basic Concepts*. Monographs in Theoretical Computer Science, Springer-Verlag
- [15] Jordan, W. (1972) Failure modes, effects and criticality analyses. In: *Proceedings of the Annual Reliability and Maintainability Symposium*, IEEE Press, pp. 30–37
- [16] Knowlton, R.E. (1989) *Hazard and operability studies : the guide word approach*, Van-couver: Chematics International Company
- [17] Lipták G, Szederkényi G, Hangos KM: Computing zero deficiency realizations of kinetic systems, *SYST CONTROL LETT* 81: 24-30, 2015

- [18] Rudan J, Szederkényi G and Hangos KM: Efficient Computation of Alternative Structures for Large Kinetic Systems Using Linear Programming, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., Vol. 71(1), pp. 71-92, 2014
- [19] Ruppert, L, D Virosztek, K M Hangos: Optimal parameter estimation of Pauli channels, JOURNAL OF PHYSICS A-MATHEMATICAL AND THEORETICAL 45: p. 265305, 2012
- [20] Seligmann, B J, E Nemeth, K M Hangos, I T Cameron: A blended hazard identification methodology to support process diagnosis, JOURNAL OF LOSS PREVENTION IN THE PROCESS INDUSTRIES 25: pp. 746-759, 2012
- [21] Tóth A, Werner-Stark A, Hangos KM: A structural decomposition-based diagnosis method for dynamic process systems using HAZID information, J LOSS PREVENT PROC 31: (1) 97-104, 2014
- [22] Venkatasubramanian, V., Rengaswamy, R., Kavuri, S.N. (2003) A review of process fault detection and diagnosis Part II: Qualitative models and search strategies. *Computers and Chemical Engineering*, **27** pp. 313–326