

UNIVERZITET U BEOGRADU
TEHNIČKI FAKULTET U BORU

Ivan Mihajlović

**RAZVOJ ALGORITMA ZA SELEKCIJU
ADEKVATNOG MODELA PROCESA NA OSNOVU
STRUKTURE ULAZNIH PODATAKA**

Doktorska disertacija

Bor, 2014

UNIVERSITY OF BELGRADE
TECHNICAL FACULTY IN BOR

Ivan Mihajlović

**DEVELOPMENT OF THE ALGORITHM FOR
SELECTION OF APPROPRIATE NUMERICAL
MODELING APPROACH**

Doctoral Dissertation

Bor, 2014

Mentor:

Dr Živan Živković, Redovni profesor Tehničkog fakulteta u Boru, Univerziteta u Beogradu

Članovi komisije:

1. Dr Dušan Teodorović, Redovni profesor Saobraćajnog fakulteta, Univerziteta u Beogradu, dopisni član SANU
2. Dr Vesna Spasojević Brkić, Vanredni profesor Mašinskog fakulteta, Univerziteta u Beogradu

Ova doktorska disertacija je rezultat višegodišnjeg istraživanja problematike modelovanja kompleksnih tehnoloških procesa u cilju njihove optimizacije. Navedena oblast istraživanja je specijalnost Odseka za inženjerski menadžment, Tehničkog fakulteta u Boru, sve od njegovog osnivanja pre punih 12 godina. Obzirom da je to i moja uža stručna specijalnost, kojom se kao član ovog odseka bavim – od njegovog osnivanja, logični ishod je i ova doktorska disertacija koja predstavlja sublimat i krunu mog dosadašnjeg rada.

Neizmernu zahvalnost dugujem Prof. Živanu Živkoviću, mom profesoru i mentoru koji me je od prvog dana mog angažmana na Tehničkom fakultetu u Boru, svojim savetima, idejama, predlozima, i nesebičnim angažovanjem usmeravao, podržavao i motivisao za sve rezultate koje sam do sada postigao.

Sama disertacija je rezultat mog poimanja da svaka naučna disciplina kao svoje konačno ishodište mora imati praktičnu primenu svojih postulata. Na taj način, svi modeli procesa, koji će u ovoj disertaciji biti predstavljeni, svoje utemeljenje su imali u konkretnim praktičnim tehnološkim sistemima – kako na nivou njihovog dizajna – tako i na nivou optimizacije njihovog rada. Na taj način, ova disertacija ima značaja i u praktično operativnom menadžmentu realnih sistema jer njen finalni ishod – algoritam – ima svoju praktičnu primenu u realnim sistemima.

Deo rezultata istraživanja predstavljenih u disertaciji su finansirani od strane Ministarstva prosvete nauke i tehnološkog razvoja u okviru projekta: TR 34023.

Razvoj algoritma za selekciju adekvatnog modela procesa na osnovu strukture ulaznih podataka

Izvod

Ova doktorska disertacija ima za cilj definisanje jedinstvenog algoritma, koji će omogućiti selekciju najadekvatnijeg načina modelovanja kompleksnih tehnoloških sistema, zasnovano na karakteristikama ulaznih i izlaznih veličina izmerenih na samom sistemu, kao i na njihovim korelacijama. U polaznim poglavljima disertacije opisuju se različiti pristupi modelovanju, dostupni u savremenoj literaturi, dok se u nastavku analizira primenjivih svakog pristupa na optimizaciju stvarnog tehnološkog procesa. Na taj način, prvi deo disertacije predstavlja opseg potencijalnih opcija i dostupnih tehnika za modelovanje kompleksnih sistema. Drugi deo se bavi analizom primenjivosti svakog od pristupa modelovanju, zasnovano na strukturi sistema i opsegu ulaznih veličina razmatranog sistema. Sve navedene teorijske pretpostavke su potom podržane primerima numeričkih modela, stvarnih tehnoloških sistema, koje su rezultovale adekvatnim zaključcima. Na kraju, istraživanje na ovoj disertaciji je rezultovalo razvojem algoritma koji se može koristiti za selekciju adekvatnom pristupa numeričkom modelovanju, za različite tehnološke sisteme, zasnovano na strukturi ulaznih podataka.

Ključne reči: Optimizacija, tehnološki procesi, modelovanje

Uža naučna oblast: Inženjerski menadžment

UDK: 303.725.36 (043.3)

Development of the algorithm for selection of appropriate numerical modeling approach

Abstract

This dissertation is dealing with development of unique algorithm which enables selection the most appropriate modeling approach on optimization of real technological processes. First part of the dissertation is presenting the scope of potential options of techniques available for complex systems modeling. Both analytical and statistical modeling approaches are described. The second part of the paper is dealing with analysis of applicability of each modeling approach, based on the structure of the system and the scope of input variables of the investigated process. Presented assumptions are than sustained with examples of numerical models of real technological systems and resulting conclusions are presented. As the examples of different modeling approaches applicability, nonferrous and ferrous extractive metallurgy systems are used. As the result of the investigation, an algorithm was developed that can be used for selection of appropriate numerical modeling approach, for different technological systems, based on the structure of available input parameters.

Keywords: Optimization, technological process, modeling

Scientific field: Engineering management

UDK: 303.725.36 (043.3)

SADRŽAJ

1. UVOD	2
2. LITERATURNI PREGLED PRISTUPA MODELOVANJU	6
2.1. Metodološki pristupi numeričkom modelovanju tehnoloških sistema	10
3. PREDMET I OPSEG ISTRAŽIVANJA	15
3.1. Ciljevi istraživanja	16
3.2. Polazne hipoteze	17
4. RAZVOJ ALGORITMA ZA SELEKCIJU ADEKVATNOG MODELA PROCESA	18
4.1. Praktični primeri M1 pristupa modelovanju	19
4.2. Praktični primeri M2 pristupa modelovanju	28
5. PRIMENA <i>ASAMA</i> ALGORITMA U MODELOVANJU REALNOG TEHNOLOŠKOG SISTEMA	84
6. ZAKLJUČNA RAZMATRANJA	97
7. LITERATURA	100
8. PUBLIKACIJE KOJE SU PROIZAŠLE KAO REZULTAT ISTRAŽIVANJA PRIKAZANIH U DISERTACIJI	116
BIOGRAFIJA	117

1. UVOD

U savremenoj nauci modeli objekata upravljanja imaju centralnu ulogu, obzirom da se zasnivaju na opštim zakonitostima ili teorijama pomoću kojih mogu predvideti ili objasniti ponašanje sistema u specifičnim situacijama. Modeli se mogu definisati u više oblika, ali što je kompleksniji fenomen za koji su definisani, od većeg je značaja da se i modeli moraju razvijati u obliku formalnog prikaza uz nedvosmisленu interpretaciju (Bridewell et al., 2006).

Naučno modelovanje predstavlja proces generisanja fizičkih, konceptualnih ili matematičkih prikaza stvarnih fenomena koje je teško posmatrati direktno (Encyclopedia Britannica). Naučni modeli se koriste da objasne i predvide ponašanje stvarnih objekata ili sistema i koriste se u širokom opsegu naučnih disciplina. Iako je modelovanje centralna komponenta savremene nauke, naučni modeli se u najboljem slučaju mogu posmatrati aproksimacijama objekata i sistema koje predstavljaju – oni nisu njihova egzaktna replika. S tim u vezi široka naučna zajednica kontinualno radi na unapređenju i rafinaciji kako postojećih modela, tako i postojećih načina i metoda modelovanja.

Zavisno od stadijuma u razvoju ili kompleksnosti sistema koji je objekat modelovanja, naučno modelovanje može rezultovati formiranjem fizičkih, apstraktnih, konceptualnih, grafičkih ili matematičkih modela. Savremena nauka nudi rastuću kolekciju metoda, tehnika i teorija o različitim načinima specijalizovanih naučnih pristupa modelovanju.

Matematički modeli, kao segment naučnih modela, su matematička slika realnosti. Odnosno, drugim rečima, opis objekta ili sistema primenom matematičkog koncepta i znakova. Proces formiranja matematičkih modela je proces matematičkog modelovanja. Postoje brojne definicije matematičkog modelovanja. Međutim, najčešće primenjivana definicija koja nedvosmisleno iskazuje suštinu je: „matematičko modelovanje predstavlja implementaciju matematike u rešavanju nestrukturiranih problema u realnim situacijama“ (Galbraith i Clatworthy, 1990). Na taj način, problemi iz svakodnevnog života koji su objekat našeg interesovanja, se transformišu u matematički problem i rešavaju upotrebom matematičkih tehnika (Cheng, 2001).

U suštini, gotovo sve u fizičkom ili biološkom svetu, bilo da je u pitanju prirodni fenomen ili uključuje uticaj tehnologije ili ljudskog delovanja, može biti objekat analize primenom matematičkih modela i može se predstaviti matematičkim izrazima. Takođe, matematički modeli su često i alat optimizacije i osnova kontrolnih mehanizama objekata ili sistema.

Numerički modeli, kao segment matematičkih modela, su modeli koji koriste određenu numeričku proceduru vremenskog uzorkovanja kako bi se dobila slika o ponašanju objekta tokom vremena. Paradoks je da sama numerička procedura izrade modela može biti sprovedena i bez poznavanja osnovnih osobina sistema koji je objekat modelovanja (strukture, broja elemenata i njihove međusobne veze). S tim u vezi, razvoj numeričkih metoda modelovanja, modelovanje kao proces je učinilo široko dostupnim, u prvom redu razvojem takozvanih tehnika modelovanja po principu tzv. „crne kutije“. Tako posmatrano, ukoliko se neadekvatno primenjuje, primena alata numričkog modelovanja u predviđanju ponašanja sistema u principu može biti manje precizno u poređenju sa realnim merenjima zasnovanim na eksperimentu. Na taj način, čak iako je terijski moguće primenjivati alate numeričkog modalovanja i za sistema koji nisu u potpunosti poznati, jasno je pravilo da što je sistem koji se želi da modeluje više poznat, to su i bolji rezultati kojema će finalni model ishodovati.

Kao posledica razvoja opšte teorije sistema, krajem 20. i početkom 21. veka, paralelno sa razvojem savremenih informaciono komunikacionih tehnologija, došlo je do sve većeg razvoja velikog broja računarskih alata za modelovanje. Na taj način, razvijene su softverske aplikacije koje se upotrebljavaju u specijalizovanim naučnim disciplinama (na primer: DWSIM za hemijsko inženjerstvo, FreeMat za brz razvoj prototipa u mašinstvu, Minsky – za razvoj i simulaciju finansijskih modela, Mobility Testbed – za razvoj transportnih modela, Step – za modelovanje u fizici ili Auto Cast – softver za modelovanje procesa livenja metala, CircuitLogix – za elektrotehniku, SimProcess – za biznis modele i mnogi drugi) ali i opšte softverske aplikacije koje su primenjive nezavisno od naučne oblasti za koju se model razvija (MATLAB – opšte prihvaćen softver za modelovanje praćen paketom SIMULINK koji se koristi za simulaciju rada modela, Mathematica – programski jezik koji je i odlična platforma za razvoj modela i simulaciju, LISREL – za razvoj modela po principu strukturne jednačine, Modelica, Simcad Pro i mnogi drugi). Svakako, aplikacije i jedne i druge vrste, u suštini nude interaktivno okruženje koje korisnicima omogućava sagledavanje strukture modela, omogućuje pokretanje modela kao simulacije, i procenu njihovih predviđanja.

Paralelno sa razvojem softverskih aplikacija, kao alata za modelovanje, odvija se značajno istraživanje računarskih metoda za prepoznavanje i strukturiranje raspoloživih informacija iz mase podataka. Značajni deo rada na ovom polju, posebno sa paradigmom „Data Mining-a“ (Fayyad et al., 1996), ističe formalizam zasnovan na drvu odlučivanja (Decision tree) i logičkim pravilima koji originalno potiču iz oblasti veštačke intellegencije (Bridewell et al., 2006). U početku ove tehnike su široku primenu imale u društvenim naukama a nedovoljno su bile zastupljene u tehnici. Danas su podjednako zastupljene u društvenim i tehničkim naukama.

Na sreću, kao alternativna paradigma početkom 21. veka, javlja se razvoj tehnika tzv. „računarskog naučnog otkrića“ (Langley, 2000), koje se bave prepoznavanjem raspoloživih informacija (otkrivanje znanja) zasnovanog na numeričkim jednačinama i drugim formalizmima prikaza koje su u širokoj upotrebi u oblasti nauke i inženjerstva. Istraživanja na ovom polju dovela su do objedinjavanja tehnika „data mining-a“ i tehnika baziranih na pronalaženju polaznih informacija za definisanje modela sistema zasnovanih na fizičkim zakonima i numeričkim jednačinama koje proističi iz njih. To dovodi do povećanja automatizovanosti procesa sakupljanja i obrade podataka u cilju definisanja modela razmatranih sistema, koji su osnova razvoja savremenih metoda modelovanja u 21. veku. Jasna je činjenica da će naučna zajednica imati benefite od računarskih alata koji kombinuju prednosti dostupnih okruženja za modelovanje sa snagama postojećih metoda za analizu i otkrivanje značaja u raspoloživim podacima o sistemu koji je objekt modelovanja.

Na taj način, rezultat razvoja savremenih softverskih okruženja za modelovanje kompleksnih procesa, ide u pravcu definisanja računarskog okvira koji omogućuje istraživačima da vrše automatsku akviziciju podataka, urade digitalno uzorkovanje, formulišu model, generišu predviđanja zasnovana na modelu, detektuju odstupanja u predviđanjima koja indiciraju potrebu za revizijom samog modela, i na kraju automatski menjaju polazni model shodno tim zaključcima.

Ciljevi modelovanja objekata ili sistema su (Mihajlovic et al., 2007):

- Upotreba modela umesto realnog sistema kako bi se merili parametri samog sistema;
- Izbegavanje rizika eksperimentisanja na realnim sistemima;
- Dobijanje rezultata čija analiza može omogućiti efikasni operacioni menadžment i optimizaciju realnih sistema;
- Smanjenje troškova koje stvara optimizacija zasnovana na korišćenju modela umesto realnog sistema.

Iako su navedeni ciljevi logični i deluju jednostavno, u kompleksnim sistemima često nije tako jednostavno dostići ih. S druge strane, većina tehničko-tehnoloških procesa, posebno u industriji, predstavljaju veoma kompleksne sistema sastavljene od velikog broja međusobno povezanih podistema i elemenata, kao i veoma komplikovanih interakcija. Posmatrano iz ugla opšte teorije sistema (General System Theory – GST), svaki takav tehnološki proces može se definisati kao kompleksni sistem sa jednom ili više izlaznih veličina (zavisnih promenjivih) i velikog broja ulaznih veličina (nezavisnih promenjivih). Prema suštini GST-a, optimizacija takvih sistema se zapravo sastoji u dobijanju željenih vrednosti izlazne veličine (veličina) koje trebaju biti unutar

unapred definisanih željenih graničnih vrednosti. Ovaj cilj se može postići na dva načina. Prvi način se zasniva na formirajući kontrolne jedinice samog sistema (regulatora). Drugi način se bazira na mogućnosti izvođenja kontrolisanih i planiranih izmena strukture sistema koji se razmatra. Međutim, uvezši u obzir kompleksnost sistema, obe metode zahtevaju adekvatni model istraživanog sistema koji se može upotrebiti kao osnova za dalju optimizaciju. Razlog za to je što se controlna jedinica zapravo zasniva na inverziji jednačine matematičkog modela objekta upravljanja (Devasia, 1996), dok sa druge strane izmena strukture realnog sistema može biti previše skupa ukoliko nije zasnovana na prethodnoj analizi i simulaciji zasnovanoj na modelu samoga sistema (Maani i Cavana, 2007). Takođe, može dovesti do pogrešne reorganizacije strukture sistema (Maani i Maharraj, 2004).

Imajući u vidu da u operativnom menadžmentu postoji verovanje da se potpuna optimizacija bilo kojeg sistema ne može postići, svaki sistem je i objekat ponovne optimizacije u budućnosti (Slack, et al., 2010). S tim u vezi, ukoliko se definiše dovoljno tačan model sistema, on se može koristiti kao alat za sledeće iteracije optimizacije, imajući u vidu na najvišem nivou valjanosti modela (prediktivna valjanost), model može rezultovati predviđanjem izlaznih vrednosti zasnovano na različitim scenarijima i kombinaciji ulaznih veličina (Kunst, 2003; Mihajlović, et al. 2007). Na taj način, razvoj preciznog modela tehnološkog procesa je od suštinskog značaja u savremenom operativnom menadžmentu tehnoloških procesa, obzirom da omogućuje znatno jednostavniji način akvizicije procesnih podataka, što je od suštinskog značaja za optimizaciju rada kompleksnih sistema.

Kompleksnost operativnog menadžmenta savremenih tehnoloških procesa, se dodatno uvećava početkom 21. veka. Razlog za to treba tražiti u činjenici da savremeni tehnološki procesi ne zahtevaju optimizaciju samo tehničko – tehnoloških i ekonomskih, već i organizacionih i ekoloških aspekata procesa. Na taj način, uspešno operativno planiranje i optimizacija bilo kog savremenog tehnološkog procesa podrazumeva prethodno definisanje procesnog modela koji uključuje veliki broj tehničkih, ekonomskih i ekoloških parametara istovremeno (Mihajlovic et al., 2011).

Na osnovu napred rečenog, izbor najadekvatnijeg pristupa modelovanju stvarnog tehnološkog procesa, je od suštinskog značaja za postizanje definisanih ciljeva modelovanja. Ova disertacija se bavi razvojem algoritma koji može biti od pomoći donosiocima odluka u izboru najadekvatnijeg pristupa modelovanju za određeni tehnološki proces. Sam algoritam je razvijen zasnovano na prethodnom iskustvu u modelovanju različitih tehnoloških sistema. Izbor najadekvatnijeg modela, je u direktnoj funkciji karaktera i strukture ulaznih podataka razmatranih procesa.

2. LITERATURNI PREGLED PRISTUPA MODELOVANJU

I pored intenzivnog razvoja metoda modelovanja u različitim oblastima nauke i tehnike, može se tvrditi da jedinstvena klasifikacija svih potencijalnih vidova modelovanja još uvek nije razvijena. Prema Willis-u i Tham-u (2009), svaki opis sistema se može smatrati modelom tog sistema. Modeli omogućuju kontrolu efekata vremena i prostora, ekstrakciju osobina i samim time uprošćavanje, i zadržavanje samo onih detalja koji su relevantni za razmatrani problem. Upotreba modela samim time smanjuje potrebu za stvarnim eksperimentima i omogućuje dostizanje mnogih različitih ciljeva sa smanjenim troškovima, rizikom i vremenom potrebnim za analizu.

Prema istim autorima (Willis i Tham, 2009), model može biti matematički ili statistički opis određenog aspekta procesa. Pored toga, model može biti u obliku kvalitativnog opisa ponašanja procesa.

Ipak sa aspekta prethodnog istraživanja i još opštije klasifikacije, modeli se najopštije mogu svrstati u jednu od dve klase modelovanja (Mihajlović et al., 2011). Prva je klasa simboličkih (u najvećem broju slučajeva numeričkih) i klasu realnih (fizičkih, materijalnih) modela.

Imajući u vidu tako generalizovanu klasifikaciju, objekat istraživanja ove disertacije (kompleksni tehnološki procesi) najčešće su u savremenoj naučnoj spoznaji podvrgnuti analizi uz upotrebu simboličkih, odnosno numeričkih modela. Pri tome, simbolički modeli opisuju objekat, proces ili pojavu na nekom od jezika (skupa simbola) karakterističnih za prirodu samog objekta upravljanja koji se istražuje.

Da bi se dalje opisao simbolički jezik modelovanja, treba početi od činjenice da je gotovo svaka naučna disciplina u početku razvijala sopstveni jezik simbola tokom svog istorijskog razvoja. Prvi jezik korišćen za opis bilo koje naučne discipline bio je naravno – verbalna komunikacija. Sledeći jezik bio je matematički jezik izražen svojim simbolizmom, relacijama i logičkim zavisnostima. Na taj način, počevši od James Watt-a i njegovog izuma centrifugalnog regulatora, koji je zapravo predstavljao prvi sistem automatske regulacije, počeo je i razvoj savremenog pristupa matematičkom modelovanju (D'Auria, 1879). Ipak, obzirom da je Watt prvenstveno bio praktičar, izumitelj i inženjer, on nije prvi razvio i matematički model svog regulatora dinamičkog sistema parne mašine (odnosno centrifugalnog regulatora). Zapravo, prvi teoretičar koji je ovaj sistem opisao upotrebom numeričkog modela bio je James Clerk Maxwell (1868). On je napisao čuveni rad “o upravljačkim regulatorima” (On governors) koji se smatra klasikom u teoriji kontrolnog upravljanja uz primenu povratne sprege (feedback control theory) i predstavlja inspiraciju čak i današnjim istraživačima u ovoj oblasti (Zheng-Ming i Wei-Ren,

2007). Potom, došlo je do daljeg istraživanja u oblasti optimizacije i kontrole dinamičkih sistema, počevši sa Routh-om (1877) i Hurwitz-om (1895) koji su istraživali stabilnost linearnih sistema, ali i paralelno sa Lyapunov-im (1892) koji je među prvima analitički razmatrao mogućnost modelovanja nelinearnih sistema, preko Lorentz-a (1966) i čuvenog “Efekta leptira”, pa sve do savremenih istraživanja krajem 20-tog i početkom 21-vog veka (Hawking, 1998; Wu i David, 2002; Golden et al., 2012; Perera i Soares, 2013, Nikolić i Teodorović, 2014 i mnogi drugi).

Jedno vreme u istorijskom razvoju matematičkog modelovanja, gotovo svako naučno i tehničko polje je razvijalo svoj jedinstveni jezik simbola. Međutim, najviše kao posledica intenzivnog razvoja informaciono-komunikacionih tehnologija, javljaju se mogućnosti modelovanja raznih pojava. Ovo je ponovo dovelo do određene standardizacije simbolizma modelovanja i njihove široke primene, što dovodi do opštosti kompjuterske simulacije i primene modelovanja. Samim time, standardni matematički simboli i logičke relacije ponovo postaju osnovni alat modelovanja. Svaka naučna disciplina potom prilagođava svoju simboliku standardnim matematičkim formama izražavanja (Mihajlović, et al., 2007).

Veliki broj autora u savremenoj literaturi bavi se razvojem modela različitih tehnoloških procesa u cilju njihove optimizacije. Na taj način, razvijaju se alati za optimizaciju tehničko – tehnoloških, ekonomskih ali i ekoloških aspekata razmatranih procesa. Takođe, veliki je broj aplikacija modelovanja koje se bave analizom efekta staklene bašte i klimatskih promena, kao posledice delovanja procesnih tehnologija.

Među prvim radovima koji se bave problematikom modelovanja i računarske simulacije, još u drugoj polovini dvadesetog veka, javlja se rad Schindel-a sa saradnicima, 1982., pod nazivom **Modelovanje i simulacija**. U ovom radu oni daju pregled o različitim aspektima modelovanja i tehnika simulacija koji se primenjuju u razvoju mikroprocesora. Ova oblast je upravo u tom periodu krenula sa svojom značajnom ekspanzijom. Oni prikazuju relacije između tehnoloških parametara procesa, fizičkih efekata i performansi samih konačnih proizvoda. Opisuju primenjivost različitih simulacionih modela sa aspekta različitih nivoa kompleksnosti modela. Sam nivo razvoja kompjuterskih tehnologija ograničava tadašnje modele na uključivanje manjeg broja uticajnih parametara u finalni model.

Potom, na prelazu u dvadeset prvi vek sa daljim razvojem savremenih informaciono komunikacionih tehnologija, sve veći broj procesnih parametara se može uvrstiti u modele tehnoloških procesa. Takođe, dolazi do razvoja računarskih tehnika dizajna eksperimenta. Na primer Chernogorova i Vabishchevich, još 1999 se bave numeričkim istraživanjem procesa očvršćavanja cilnidričnih ingota u metalnom kalupu pri različitim tehnološkim uslovima

proizvodnje. U svojim istraživanjima su koristili metod komputativnog dizajna eksperimenta. Kod razvoja modela, u obzir su uzeli veliki broj parametara procesa koji mogu biti od uticaja na ishod samog procesa izrade ingota.

Finalno, početkom 21. veka oblast interesovanja autora postaju obnovljivi i alternativni izvori energije, te se javljaju radovi koji uključuju modelovanje u ovoj oblasti. Gaska i Wandrasz, 2008. se bave matematičkim modelovanjem procesa formiranja goriva od biomase. Oni vrše analizu procesa dobijanja goriva od biomase na osnovu detaljne tehničke, ekološke i ekonomske analize. U cilju optimizacije procesa mešanja komponenti goriva, formiraju matematički model procesa. Model je formiran kao grupa strukturiranih podataka koja jedinstveno identificuje realni proces i vrši konverziju navedenih podataka u algoritam zasnovan na problemu linearнog programiranja. U radu takođe predstavljaju optimizaciju parametara procesa formiranja goriva koristeći modifikovani simpleks algoritam sa polinomijalnim vremenom.

U zadnjih nekoliko godina literatura obiluje radovima u kojima autori koriste savremene računske tehnike za izradu numeričkih modela tehnoloških procesa. Na primer Grosmann et al., 2013, se bave metodama modelovanja i analize procesnih lanaca vrednosti u cilju razvoja novih tehnologija. Oni pokušavaju da otiju zavisnosti uzročnik-posledica između osobina materijala i uslova proizvodnje, koji se tiču zahtevanih kvaliteta finalnih proizvoda.

Marin et al., 2013 su proučavali proces presovanja aluminijumskih profila, uvezši u obzir različite tipologije i karakteristike. Proces je proučavan iz ugla karakteristika značajnih za proizvođače. Za analizu i definisanje polaznih osnova za modelovanje procesa korišćena je metodologija konačnih elemenata (Finite Element Method - FEM).

Avalle et al., 2014, su na osnovu eksperimentalno dobijenih rezultata iz procesa mehaničkog širenja cevi tankih zidova formirali numerički model koji je primenjiv u praksi. Razvijeni model je upotrebljen za identifikaciju osobina materijala upotrebom inverznog metoda i potom za proučavanje tehnološkog procesa ekspanzije cevi upotrebom pojednostavljenog ali dovoljno tačnog opisa na osnovu modela.

Jovanović et al., 2014, su vršili analizu osetljivosti kinetičkih faktora i mogućnost njihove upotrebe za numeričko modelovanje procesa uklanjanja isparljivih komponenti srpskog lignita. U svom istraživanju su koristili CFD model (Computational Fluid Dynamics).

Pored optimizacije procesa, obnovljivi izvori energije i zaštita životne sredine sve više postaju oblast interesovanja savremenih istraživača, tako da se publikuju brojni radovi koji se bave modelovanjem u oblasti energetske efikasnosti i zaštite životne sredine. Na primer, Saidi et al.,

2014., se bave modelovanjem potencijalnih rizika u rafinerijama nafte i gasa, primenom fazi logike (Fuzzy Logic). Prema ovoj grupi autora, prednost korišćenja fazi modela je u prevazilaženju neizvesnosti održavanja zasnovanog na riziku. Takođe, ovaj pristup se može koristiti i za benčmarking budućih kvarova u sistemu. Za svoje istraživanje su koristili podatke o 23 različitim vidova havarija i kvarova u rafinireiji nafte i gasa.

Zhu et al., 2013., su se bavili modelovanjem za planiranje javnih sistema napajanja električnom strujom koji uključuju i kontrolu zagadenja vazduha – u Pekingu. Razvijeni model je primenjen za planiranje elektro sistema Pekinga uz korišćenje većeg broja energetskih izvora, većeg broja elektrana, za veći broj vremenskih perioda. Za proračun potrebe u proširenju kapaciteta energetskog sistema koristili su tehnike linearног programiranja bazirane na mešovitom celobrojnom pristupu. Prema tvrđenju ove grupe autora, rezultati njihovog istraživanja mogu biti od koristi menadžerima sistema za identifikaciju dizajna sistema u odlučivanju koji dizajn sistema najbolje može biti optimiziran u uslovima neizvesnosti.

U novijoj literaturi, javlja se i sve veća prisutnost razvoja metodologija modelovanja u oblasti ekologije. Tako da se u radu Johnson i Omland (2004) upravo bave metodama selekcije adekvatnih modela u ekologiji. Obzirom da u 21-vetu veliki problem počinje da stvara zagađenje vazduha izazvano saobraćajem u velikim gradovima, veliki broj autora se bavi razvojem modela koji mogu dovesti do predikcije i prevencije pojačanih koncentracija polutanata u vazduhu. Venegas et al., 2014., su primenili „Semi-Empirical Urban Street (SEUS) model”, koji je zapravo jednostavan matematički model zasnovan na merenju koncentracije polutanata u vazduhu unutar tzv. “kanjona ulica”. Kao uticajne parametre modelovanja su koristili količinu emisije, vezanu za količinu automobila, širinu samih ulica, brzinu rasipanja štetnih primesa kao i već postojeću koncentraciju polutanata u vazduhu. Zaključili su da je od najvećeg uticaja pravac, brzina vetra kao i koncentracija saobraćaja u datom momentu posmatranja. Sve neophodne podatke su merili na ulicama evropskih gradova.

Međutim, obzirom da su, pored saobraćaja, veliki izvor zagađenja i tehnološki procesi i fabrike, postoji i aspekt modelovanja, u savremenoj literaturi, koji se bavi analizom zagađenja vazduha iz tehnogenih izvora. Npr. Nikolić et al., 2009., se bave višekriterijumskom analizom zagađenja vazduha sa SO_2 i PM_{10} u urbanom okruženju topionice bakra u Boru, Srbija. Kao alat za modelovanje, analizu i predikciju koncentracije polutanata korišćen je PROMETHEE/GAIA method, za rangiranje urbanih zona prema koncentraciji polutanata.

Takođe, od velikog je interesa i uticaj tehnogenog i zagađenja vazduha od saobraćaja na klimatske promene. Takav vid modelovanja je predstavljen u radu Trail et al., 2014. U ovom radu se, na osnovu podataka o koncentraciji NO_x i SO_x u vazduhu velikih gradova u SAD,

izmerenih u periodu 2006-2010, vrši predikcija koncentracije do perioda 2048-2052. Na osnovu dobijenih podataka autori iznose zaključke o potencijalnim trendovima distribucije polutanata u vazduhu u budućnosti.

Na osnovu gore navedenih primera očigledna je velika primenjivost različitih alata modelovanja u različitim oblastima savremene nauke i tehnike. Takođe, prisutna je i diverzifikacija potencijalnih alata i tehnika modelovanja koje autori primenjuju na različite tehnološke procese koji su objekat njihovog proučavanja. U nekim slučajevima čak nije ni najjasnije predočeno iz kog razloga su se autori opredelili za konkretan metod modelovanja razmatranog procesa. Često se izbor vrši, jednostavnom selekcijom nekog od načina modelovanja koji su primenjivali drugi istraživači koji su modelovali slične sisteme.

U daljem tekstu disertacije je izvršen pokušaj da se na određen način izvrši segmentacija i klasifikacija osnovnih metoda modelovanja a potom, u drugom delu, da se formira algoritam koji može olakšati selekciju adekvatnog metoda modelovanja procesa, na osnovu raspoložive strukture samog sistema ili strukture ulaznih podataka. U disertaciji se najveći akcenat stavlja na modelovanje procesa u oblasti industrije, u prvom redu procesi u obojenoj i crnoj metalurgiji.

2.1. Metodološki pristupi numeričkom modelovanju tehnoloških sistema

Uzevši u obzir činjenicu da matematički model mora da reflektuje stvarni tehnološki proces što je bolje moguće, kao i ograničenja do kojih savremeni aparatus matematičkog modelovanja može stići; javlja se pitanje idealizacije realnog procesa. Na taj način, s jedne strane ne treba zanemariti primarne karakteristike procesa, dok sa druge strane ni matematički model ne sme biti suviše kompleksan. Razlog za to je što suviše kompleksan matematički model može otežati samu matematičku analizu. Takođe, kompleksnost sužava primenjivost modela na usko okruženje neke od ravnotežnih tačaka sistema.

Shodno tome, prema analizi raspoložive literature i prethodnog istraživanja u ovoj oblasti (Mihajlović et al., 2007; Wilis i Tham 2009; Đorđević et al., 2010), ukoliko se ostave po strani modeli u formi realnih maketa objekata (fizički modeli), numerički modeli mogu biti zasnovani na osnovi dva polazna pristupa: matematički pristup i statistički pristup (Wilis i Tham 2009). Potom, dalja klasifikacija se može zasnivati na načinu razvoja i razrade samih modela. Shodno tome, razvoj modela može biti zasnovan na poznatoj teorijskoj osnovi i naučnoj spoznaji samoga sistema. Ovaj vid modelovanja će u daljem tekstu biti označen kao M1 pristup modelovanju (Đorđević et al., 2010; Mihajlović et al., 2011). Ova oznaka će biti korišćena i iz razloga što je ovakav vid modelovanja u literaturi poznat i kao „prvi princip modelovanja“ (Terence, 1987).

Najčešće se u takvim slučajevima matematički model zasniva na sistemu diferencijalnih jednačina i struktura sistema je posladica spoznaje teorijske osnove samog razmatranog sistema. Zavisno od samog sistema, struktura finalnog modela može biti prikaz zbirnog parametra (lumped parameter) ili ravnomerno raspodeljenih parametara sistema (distributed parameter representation). Modeli zasnovani na zbirnom parametru se najčešće opisuju ordinarnim (običnim) diferencijalnim jednačinama (ODE), dok se distributivni parametri opisuju sistemima parcijalnih diferencijalnih jednačina (PDE) (Wilis i Tham, 2009). ODE se koriste za opis sistema u jednoj dimenziji, najčešće vremenu (formiranje dinamičkog sistema na osnovu vremenskih serija). PDE modeli uzimaju u obzir više dimenzija, kao i moguću nehomogenost u ponašanju i strukturi sistema, na njegovim različitim lokacijama.

Za M1 pristup modelovanju, u celini, kao preduslov je neophodno poznavati strukturu sistema i prirodu samog sistema koja se reflektuje u nekom fizičkom zakonu koji opisuje njegovo ponašanje. Potom, se razvija sam model u formi ODE ili PDE sistema diferencijalnih jednačina, zavisno od stanja sistema, odnosno zavisno od toga koliko nezavisnih promenljivih je neophodno za opis stanja sistema. Validacija konstruisanog modela se zasniva na upoređenju rezultata rešenja sistema diferencijalnih jednačina sa izlazima realnog sistema. Međutim, ovakvi modeli u sebe uključuju brojne aproksimacije i uprošćavanja. Posebno su kompleksniji modeli formirani za sisteme sa distributivnim parametrima, na bazi PDA. U velikom broju slučajeva se čak i takvi sistemi aproksimiraju nizom ODE i tada se dobijaju pojednostavljenja polaznog modela.

Takođe, obzirom da potpuno linearni sistemi u prirodi ne postoje (McClure, 1998), već se samo mogu posmatrati kao teorijski konstrukt, uspeh M1 pristupa modelovanju se zasniva na linearizaciji sistema nelinearnih diferencijalnih jednačina u okruženju izabrane ravnotežne tačke sistema. Ovo vodi ka poteškoćama modelovanja kompleksnih sistema, koji mogu imati više od jednog stabilnog stanja i samim time više od jedne ravnotežne tačke (Weir, 1991; Brown, 2007; Đorđević et al., 2010; Mihajlović, 2011).

Takođe, dinamičko ponašanje realnih sistema dodatno otežava ovaj pristup modelovanju. Samim time, ovakav pristup modelovanju sistema je najčešće primenjiv za jednostavne realne (fizičke sisteme) i, naravno, za apstraktne sisteme pre njihove realne konstrukcije. Shodno tome, najčešće usled vremenskih ograničenja, razvoj modela M1 pristupom često može biti praktično neefikasan. Ovo je posebno izraženo kada je prethodno znanje o procesu koji se želi modelovati nedovoljno jasno ili ukoliko je proces toliko kompleksan da se rezultujući sistem diferencijalnih jednačina ne može rešiti u realnom vremenu. U takvim okolnostima, najčešće se pristupa potpuno drugačijem pristupu modelovanju, koji će u daljem tekstu biti označen kao M2 pristup modelovanju (Đorđević et al., 2010; Mihajlović, 2011).

Ovaj način modelovanja (M2) se zasniva na eksperimentalno dobijenim, ili izmerenim, funkcionalnim zavisnostima stvarnog objekta upravljanja u nestacionarnom režimu. U literaturi je ovaj vid modelovanja prisutan i pod nazivom „identifikacija sistema“ ili „modelovanje upravljanju podacima“ (Sjoberg et al., 1995). Kod ovog pristupa modelovanja koriste se posmatranja (merenja) sistema kako bi se model razvio empirijski. Često se koristi unapred dizajniran eksperiment kako bi se sakupili neophodni podaci o sistemu. Na taj način, upotrebom izmerenih izlaza sistema, dobijenih nakon uvođenja predefinisanih ulaznih signala, definiše se matematički model objekta sistema. U ovakvim slučajevima najčešće nije neophodno detaljno poznavati strukturu sistema (broj elemenata, njihove karakteristike i način međusobnog povezivanja emelemenata), kao ni fizičke zakonitosti ponašanja sistema. U ovom pristupu, dovoljno je sakupiti izlaze sistema, nakon uvođenja prethodo zadatih vrednosti ulaznih veličina i na taj način formirati polaznu bazu podataka za dalji proces modelovanja. Ovo je jedan od razloga zbog kojeg se ovakav pristup naziva modelovanje po principu „crne kutije“ (Taylor et al., 2003; Giraldo-Zuniga et al., 2006; Mihajlović et al., 2014). Ovakav vid modelovanja realnih sistema dobija sve više na značaju i na primeni u operativnom menadžmentu, iz praktičnih razloga svoje jednostavnosti.

Prema tome, jednostavno rečeno, modeli po principu crne kutije jednostavno opisuju vezu između ulaza i izlaza razmatranih sistema. Sami parametri funkcija koje opisuju ovu vezu najčešće nemaju realnog fizičkog značaja u smislu ekvivalencije procesnim parametrima, već su reprezent kvazistrukture sistema, koju sam alat modelovanja kreira na bazi relacije ulaznih i izlaznih veličina. Ovo je jedan od nedostataka M2 načina modelovanja u poređenju sa M1 modelovanjem. Ipak, ukoliko je cilj da se verno predstavi zavisnost izlaza od ulaza sistema, i da se na osnovu toga mogu predviđati i analizirati neki trendovi ponašanja samoga sistema, onda je i ovaj vid modelovanja dovoljno adekvatan. Posebno, ukoliko se uzme u obzir jednostavnija procedure izrade ovakvih modela, jasna je široka ekspanzija ovih modela.

Sami modeli zasnovani na M2 metodologiji se dalje mogu klasifikovati na linearne i nelinearne forme. Što se tiče linearnih modela, predominantni su modeli koji se zasnivaju na vremenskim serijama (vremenski trendovi) ili na funkciji porenosa sistema. Uz dovoljno relevantnih podataka o ulaznim i izlaznim veličinama, može se koristiti veliki broj tehnika da bi se identifikovali parametri linearnih modela po principu crne kutije (Eykhoff, 1974). Ipak, najčešće korišćene tehnike za ovu vrstu modelovanja su one koje se zasnivaju na algoritmima baziranim na najmanjem kvadratu (Willis i Tham, 2009).

U kategoriji nelinearnih modela, vremenske serije se kombinuju sa rešenjima koja se generišu upotrebom generatora slučajnih brojeva, makar na nivou polaznog rešenja. U te svrhe se često koristi modelovanje na principu veštačkih neuronskih mreža. Ovaj vid modelovanja poznat je još

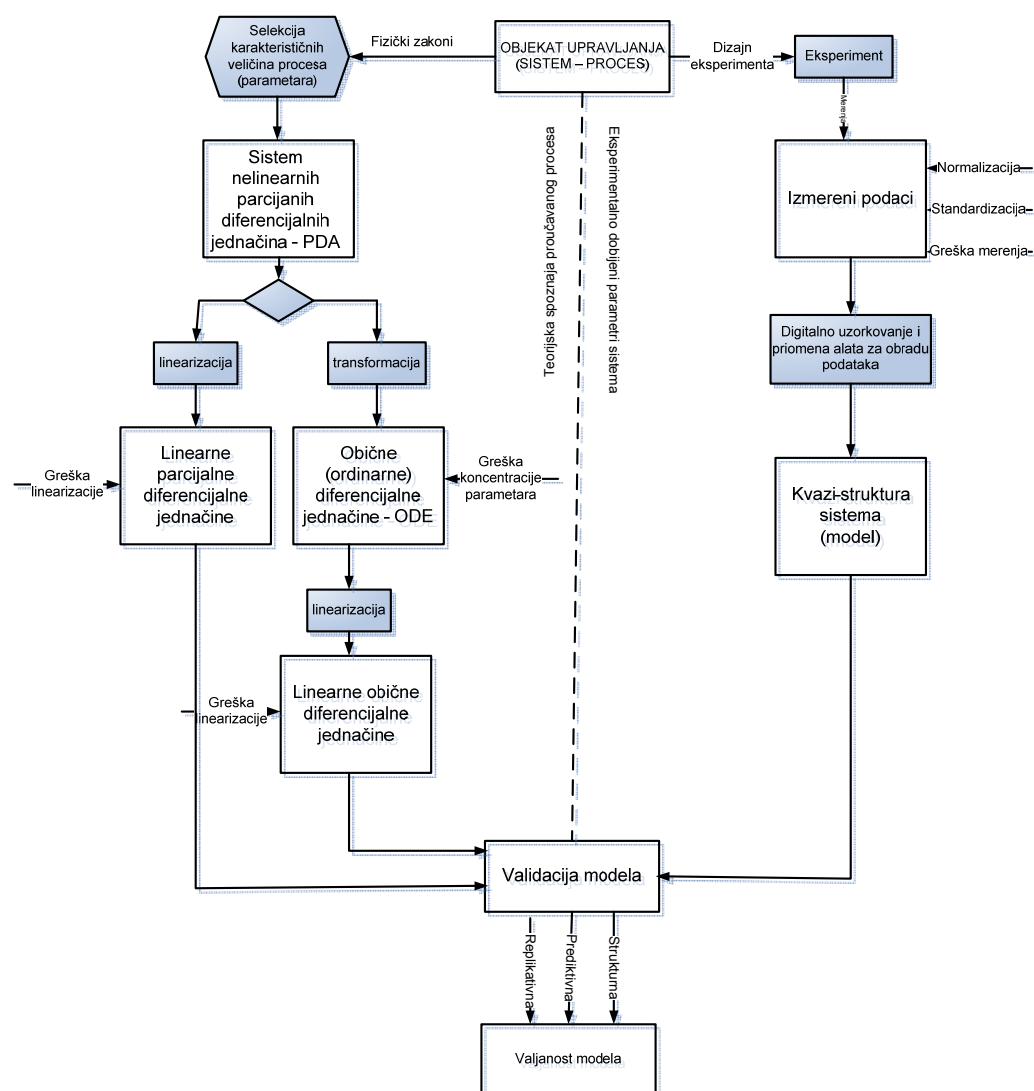
sa kraja dvadesetog veka, te se ne može smatrati potpuno novim (Lippmann, 1987; Rummelhart i McClelland, 1986; Cybenko, 1989). Međutim, razvoj savremenih softverskih alata koji u sebe uključuju module za modelovanje po principu veštačkih neuronskih mreža, ponovo dovode do sve aktivnijeg korišćenja ovakvog vida modelovanja (Taylor et al., 2003; Giraldo-Zuniga et al., 2006; Živković et al., 2010; Mihajlović et al., 2014).

Što se tiče statističkog modelovanja, postoji indikacije u literaturi da i ovaj vid modelovanja na neki način spada u kategoriju modelovanja po principu crne kutije. Na taj način, modelovanje uz primenu višestruke linearne regresione analize (MLRA), svakako može da se svrsta u kategoriju linearnog statističkog modelovanja, dok npr. veštačke neuronske mreže predstavljaju kategoriju nelinearne statističke analize, sa jednim užim opsegom ulaznih veličina (Demuth i Beale, 2002; Chung-Ming, 2005; Mihajlović et al., 2010; Živković et al., 2010; Mihajlović et al. 2013). Takođe, modelovanje koje se zasniva na fazi logici (Fuzzy Logic), pored toga što se kategorise kao jedan od vidova kvalitativnog načina modelovanja, zasnovano na lingvističkoj interpretaciji pravila za segmentaciju ulaznih veličina po takozvanom 'IF-THEN-ELSE' principu (Jang et al., 1997; Willis i Tham, 2009), takođe se svrstava i u nelinearne statističke metode sa više segmenata opsega ulaznih veličina (Jang et al., 2003; Guneri et al., 2011; Savić et al., 2013; Mihajlović et al., 2014). Potvrda tome je i činjenica da analiza vremenskih serija, koja ima jako statističko uporište pored toga što se svrstava u M2 modelovanja za definisanje linearnih i nelinearnih jednačina modela, takođe ima i jako uporište za naknadnu statističku analizu. Sam statistički pristup modelovanju je u savremenoj nauci postao neophodan zbog postojanja neizvesnosti koje su alocirane u prvom redu u okruženju određenih procesnih sistema. Same tehnike statističkog modelovanja vode poreklo iz statističke analize podstaka, teorije informacije, teorije igara i teorije odlučivanja (Willis i Tham, 2009). Naravno i ovi modeli imaju izvesne nedostatke, u prvom redu jer se dinamičko ponašanje sistema ne može njima opisati. Ipak u savremenoj kontorlnoj praksi, ovi modeli igraju značajnu ulogu kao pomoć kod donošenja odluka višeg nivoa, praćenja procesa, analize podataka i naravno statističke kontrole kvaliteta i statističke kontrole procesa.

Upoređenje odnosa između načina modelovanja zasnovanog na teorijskoj spoznaji i eksperimentalno dobijenim pokazateljima sistema, predstavljeno je na Slici 2.1 (Erdeljan, 2014). Očigledna je razlika u postizanju finalnih modela po ova dva pristupa. Međutim, zajedničko bilo kojem načinu modelovanja je da modeli koji rezultuju trebaju imati validaciju svoje valjanosti na kraju.

Ukoliko bi se napravila korelacija ove klasifikacije načina modelovanja i metoda M1 i M2, M1 metodologija modelovanja bi obuhvatala prostor predstavljen na levoj polovini slike 2.1, dok je M2 metodologija predstavljena na desnoj polovini. U ovoj disertaciji, oba načina modelovanja

M1 i M2, biće dalje diskutovani na praktičnim primerima modelovanja različitih tehničkih sistema. Biće predstavljen razvoj apstraktnog modela, zasnovan na polaznoj ideji i teorijskom konceptu budućeg sistema, pre njegove realne konstrukcije. Potom će biti definisani različiti vidovi formiranja jednačina modela na bazi poznavanja zakonitosti i strukture realnih sistema, potom će biti predstavljeno modelovanje sistema zasnovanu na podacima sakupljenim merenjem ulaznih i izlaznih veličina sistema, da bi na kraju bilo predstavljeno modelovanje sistema zasnovano na statističkoj analizi metodama linerane i nelinearne statističke analize.



Slika 2.1. Odnos modelovanja sistema zasnovanog na teorijskoj spoznaji i eksperimentalnim merenjima

3. PREDMET I OPSEG ISTRAŽIVANJA

Na osnovu pregleda literature, predstavljenog u prethodnom poglavlju, i uvodnih razmatranja može se zaključiti da dosadašnja literatura, i pored velike pažnje koja je posvećena problemu modelovanja kompleksnih tehničkih sistema, nije na sistematizovan i metodološki potpun način dala koncept ili algoritam koji na odgovarajući način definiše najadekvatniju proceduru za definisanje konačnog modela sistema bazirano na odnosima ulaznih i izlaznih veličina razmatranoga procesa (odziv sistema) kao i na strukturi samoga sistema. Ove činjenice ostavljaju dovoljno prostora za dalja istraživanja u oblasti modelovanja kompleksnih tehničkih sistema.

U prethodnom tekstu je naglašeno da uloga modela u prirodnim, društvenim i tehničkim naukama ima poseban značaj. Iako je proces modelovanja kompleksnih tehničkih sistema veoma prisutan u stručnoj literaturi, ne može se još uvek tvrditi da su svi aspekti razvoja matematičkih modela, kao i same procedure modelovanja u potpunosti poznati. Posebno je prisutna činjenica da se u savremenoj stručnoj praksi sve više teži unifikaciji postojećih načina modelovanja sa akcentom na korišćenju jedinstvene procedure modelovanja bez obzira na tip i strukturu sistema koji se modeluje. Iako je jedan od ciljeva opšte teorije sistema upravo u iznalaženju jedinstvenih zakonitosti kojima je moguće opisivati i proučavati sve sisteme, bez obzira na njihov način postanka ili pojavnji oblik (Hofkirchner and Schafranek, 2011), adekvatnost samog procesa modelovanja ipak u velikoj meri zavisi od karaktera ulaznih i izlaznih veličina sistema (Straussfogel i von Schilling, 2009). Takođe, postoji razlika u proceduri modelovanja u zavisnosti da li su ulazne i izlazne veličine sistema dobijene posmatranjem realnog sistema u regularnom režimu rada ili su generisane eksperimentom koji je unapred planiran i planski organizovan.

Oslanjujući se na rezultate posmatranja ili eksperimentalnog merenja moguće je projektovati model koji odgovara razmatranoj pojavi i na osnovu koga je, metodom simulacije rada sistema, moguće formirati zaključke i obogatiti kako praktična tako i teorijska saznanja o samoj pojavi koja se modeluje. Rukovodeći se ovim zaključcima planiraju se eksperimenti i posmatranja čiji se osnovni zadatak sastoji u potvrdi ili opovrgavanju prepostavljenih teorijskih rezultata i hipoteza o posmatranom sistemu. Na taj način rezultati posmatranja predstavljaju fundamentalni prilaz u rešavanju velike većine savremenih, akutnih problema prirodnih, društvenih i tehničkih nauka i neraskidivo su povezani sa procesom projektovanja modela. Od karaktera i strukture podataka koji su dobijeni posmatranjem ili eksperimentalnim merenjima na sistemu, koji je objekt proučavanja, u mnogome zavisi najadekvatnija metodologija za izradu konačnog modela koji će u velikoj meri oponašati ponašanje samoga sistema.

Na osnovu literaturnih izvora, kao zaključak analize literature predstavljene u prethodnom poglavlju, u sištini se savremeni metodi modelovanja kompleksnih tehničkih sistema mogu svesti na dva osnovna pojавna oblika: *Prvi način* modelovanja (M1) se zasniva na pretpostavci da je matematički model objekta posmatranja predstavljen u vidu sistema diferencijalnih jednačina. Imajući u vidu kompleksnost i raznolikost objekata modelovanja, najčešće njihovo potpuno opisivanje zahteva veoma složen matematički model objekta izražen nelinearnim parcijanim diferencijalnim jednačinama. Iz tog razloga se gotovo uvek pristupa delimičnoj ili potpunoj idealizaciji sistema u cilju modelovanja. Stepen idealizacije procesa zavisi od broja i karaktera usvojenih pretostavki. *U drugom prilazu* modelovanju (M2), polazeći od eksperimentalno snimljenih funkcionalnih zavisnosti ponašanja realnog objekta u nestacionarnom režimu, moguće je korišćenjem različitih vidova identifikacije odrediti matematički model objekta. Kod ovog načina modelovanja, moguće je primeniti analitičke i statističke metode modelovanja. Kod statističkog modelovanja moguće je primeniti linearne i nelinearne statističke metode. Konačna ocena pouzdanosti matematičkog modela, dobijenog bilo primenom metodologije M1 ili metodologije M2, može se samo približno izreći i to na osnovu detaljne analize svih usvojenih pretpostavki i rezultata kojima ishoduje razmatrani model. Stepeni vrednosti (valjanosti) modela, dobijeni procenom modela su: Replikativna valjanost (najniži stepen), Prediktivna valjanost i Strukturalna valjanost (najviši stepen koji je često nedostizan).

Samim time, predmet istraživanja koji je tema ove disertacije je upravo u formiranju algoritma koji će rezultovati kreiranjem najadekvatnijih matematičkih modela, koji će opisivati razmatrane kompleksne tehničke procese na nivou prediktivne valjanosti. Pri tome, algoritam će definisati potencijalne načine za izradu finalnih modela na osnovu karaktera i strukture polaznih podataka dobijenih posmatranjem ili eksperimentom na razmatranom sistemu. Ova oblast istraživanja nije dovoljno istražena u savremenoj stručnoj literaturi.

3.1. Ciljevi istraživanja

Osnovni cilj istraživanja je da se formira algoritam sa opisanim koracima u selekciji najadekvatnije procedure izrade modela sistema zavisno od karaktera raspoloživih podataka o sistemu. Tako definisan koncept biće zasnovan na dosadašnjoj praksi modelovanja realnih tehničkih sistemima koji će biti opisani kao objekti modelovanja. Biće uzet u obzir različit pristup modelovanju sistema u funkciji njihove složenosti, karakterističnih veličina stanja, ali će biti analizirane i različitosti u segmentima modelovanja za slučaj realnih sistema kod kojih je vršena akvizicija podataka posmatranjem procesa rada u toku normalnih radnih operacija i slučaja modelovanja sistema čiji je rad simuliran u eksperimentalnim uslovima. Sami eksperimenti biće dizajnirani primenom savremenog koncepta faktorskog dizajna eksperimenta.

Samim time, cilj istraživanja na ovoj disertaciji je da se pokaže kako primena određene kombinacije metoda za definisanje modela kompleksnih tehničkih sistema može formirati algoritam za selekciju najadekvatnije procedure modelovanja u funkciji strukture samoga sistema i odnosa ulazni i izlaznih veličina. Cilj je i da rezultujući algoritam ima svoju praktičnu primenu u optimizaciji realnih industrijskih procesa.

3.2. Polazne hipoteze

Na osnovu navedenog predmeta i ciljeva istraživanja problematike razvoja algoritma za selekciju adekvatnog modela procesa na osnovu strukture ulaznih podataka, mogu se definisati sledeće hipoteze koje predstavljaju osnovni okvir za istraživanje u ovom radu:

Ho - Moguće je kombinacijom različitih segmenata modelovanja, prisutnih u brojnim kvantitativnim i kvalitativnim metodama, formirati algoritam za selekciju najadekvatnije metode matematičkog modelovanja primenljiv u realnoj praksi.

H1 - Izbor adekvatne metode za modelovanje kompleksnih tehničkih sistema direktno je zavistan od karakteristika sistema.

H2 - Izbor adekvatne metode za modelovanje kompleksnih tehničkih sistema direktno je zavistan od korelacije odnosa ulaznih i izlaznih veličina sistema.

4. RAZVOJ ALGORITMA ZA SELEKCIJU ADEKVATNOG MODELA PROCESA

Sami koraci razvoja algoritma za selekciju adekvatnog modela procesa, zasnovani na strukturi ulaznih podataka, kao i na korelaciji ulaznih i izlaznih veličina sistema, biće opisani u daljem tekstu. Koraci u razvoju algoritma biće ilustrovani praktičnim primerima različitih metoda izrade modela realnih tehnoloških procesa. Metodologija koja je primenjivana u konkretnim slučajevima modelovanja pojedinih sistema, biće detaljno opisana u toku opisa same procedure modelovanja za svaki konkretni sistem.

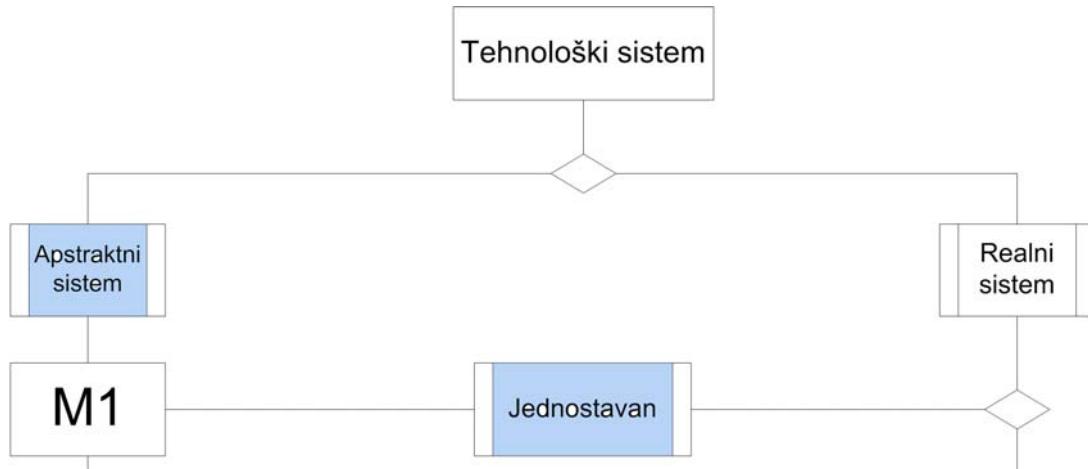
Istraživanja koja su poslužila za definisanje samih modela su bila bazirana na prikupljanju podataka akvizicijom iz realnih tehničkih procesa ali i na osnovu eksperimenata u laboratorijskim uslovima. Razlog za analizu modelovanja upravo tehničkih sistema je u činjenici da su podaci iz oblasti tehnologije ekstrakcije metala (iz oblasti obojene i crne metalurgije), u velikoj meri dostupni za istraživanja na Tehničkom fakultetu u Boru. Takođe, dostupni su i podaci iz proizvodne prakse ekstrakcije metala iz realnih fabričkih postrojenja. Ovi sistemi su zbog svoje kompleksnosti i dobar predmet izučavanja procedure modelovanja.

Za statističku obradu podataka korišćeni su SPSS program i Origin Lab, koji su pomogli u definisanju i obradi uzorka. Procedura modelovanja je zasnovana na primeni SPSS, MLAB i MATLAB softverskih alata.

Prema tome, naredni tekst disertacije je zasnovan na stvarnim praktičnim primerima i istraživanjima kompleksnih sistema. Takođe, predstavljeni rezultati su podržani dodatnom teorijskom osnovom svakog pristupa modelovanju, najviše iz ugla opravdanosti izbora najadekvatnijeg pristupa modelovanja za konkretnе tehnološke procese. Na kraju, svi predstavljeni primeri modelovanje realnih tehnoloških sistema, rezultovali su jedinstvenim algoritmom koji može biti od koristi donosiocima odluka kada odlučuju o načinu modelovanja za konkretni objekat upravljanja.

Uzveši u obzir polaznu klasifikaciju i opis procedura modelovanja, datih u prethodnom tekstu, prva odluka koju donosilac odluka treba da doneše, pre razvoja modela procesa je zasnovana na tome da li se radi o realnim (fizičkim) sistemima ili je u pitanju apstrakcija sistema. Naravno, ovde treba napomenuti da gotovo svi tehnički sistemi pre nego što zaista postignu svoj fizički oblik kreću od apstraktne forme (ideja, koncept, opis budućeg sistema).

Ukoliko se radi o apstraktnoj formi budućeg sistema, ili ukoliko je u pitanju jednostavna forma realnog sistema, logično je pokušati izradu modela sistema zasnovano na M1 proceduri modelovanja (Slika 4.1).



Slika 4.1. Izbor M1 pristupa modelovanja abstraktnih ili jednostavnih realnih sistema

4.1. Praktični primeri M1 pristupa modelovanju

Kao što je naglašeno u prethodnom tekstu, prvi pristup modelovanju (M1) zahteva gotovo potpuno znanje o strukturi budućeg ili jednostavog postojećeg – fizičkog sistema. Takođe, moraju u potpunosti biti poznati prirodni ili fizički zakoni koji opisuju ponašanje sistema. Tu treba uzeti u obzir da fizički zakon, ili naučni zakon, predstavlja naučnu generalizaciju zasnovanu na empirijskom posmatranju fizičkog ponašanja, ili predstavlja prirodni zakon budućeg ponašanja sistema (Princeton.edu). Prema tome, ne treba očekivati da je ovaj oblik pristupa modelovanju optimalan izbor za veoma kompleksne sisteme. Naravno, za modelovanje apstraktnih sistema, pre njihove finalne konstrukcije, ovaj pristup je primenjiv ali uz znatno uprošćavanje i segmentaciju kompleksnih sistema (Mihajlović et al., 2013; Mihajlović et al., 2014). U takvim uslovima, zasnovano na fizičkom zakonu na kom se bazira razvoj modela razmatranog sistema kao i njegov budući rad, razvija se potpuno nova jednačina matematičkog modela.

Kao praktičan primer M1 pristupa u modelovanju apstraktnog sistema, pre konstruisanja njegove realne forme, može se predstaviti istraživanje publikovano u radu (Mihajlović et al., 2010). Ovo je upravo bio slučaj gde je jednačina modela korišćena za simulaciju rada tehnološkog sistema

pre njegove fizičke konstrukcije, odnosno model apstraktnog sistema je korišćen za definisanje optimalnih parametara tehnološkog procesa još na nivou njegovog dizajna.

Samo istraživanje je sprovedeno kao deo projekta “Project of Reconstruction and Modernization of Cast house and Slag Granulation at Blast Furnace No.4 at Mittal Steel, Zenica – Cast house reconstruction”, koji je finansiran od strane kompanije Mittal Steel, Zenica (Bosna i Hercegovina). Projekat se odnosio na izgradnju i rekonstrukciju linije za livenje čeličnih ingota uz prethodnu vakuum degazaciju, sa ciljem dobijanja čelika visokog kvaliteta koji se može svrstati u kategoriju materijala naprednih karakteristika.

Cilj istraživanja, koje je rezultovalo razvojem numeričkog modela, bio je određivanje optimalnih uslova procesa vakuum degazacije čelika, kao prethodne faze operacije livenja ingota. Prema tome, razvijena je jednačina matematičkog modela transfera toplote i mase u procesu vanpećne degazacije rastopa metala uz uduvavanje inertnog gasa. Na osnovu rezultata numeričkog modela, bilo je moguće izračunati potrebno vreme za uklanjanje vodonika iz rastopljenog čelika u različitim uslovima odvijanja procesa i na osnovu toga dizajnirati potrebnu opremu. Naime, obzirom da se proces odvija u rastopu čelika, vreme degazacije je od suštinskog značaja jer usled predugog trajanja može doći do neželjenog hlađenja rastopa.

Inače, sam proces degazacije čelika se odvija smeštanjem lonca sa rastopom u vakuum komoru sa niskim pritiskom, koja je hermetički zatvorena i spojena sa pumpnim sistemom. Vakuum pospešuje izdvajanje rastvorenih gasova iz rastopa. Ova procedura se primenjuje kod proizvodnje niskougleničnih, mikro legiranih, vatrostalnih i drugih klasa čelika sa naprednim karakteristikama. Uklanjanje gasova može se pospešiti uvođenjem inertnog gasa, najčešće argona, u rastop čelika. Argon, koji se uvodi kroz otvor na dnu lonca, na svom putu ka površini rastopa sa sobom odnosi deo rastvorenih neželjenih gasova. Kada se određeni podpritisak ostvari u sistemu, rastop počinje da „ključa“. Ovo označava početak degazacije. Ukoliko se ne primenjuje argon, već samo vakuum, degazacija uključuje samo površinske slojeve rastopa u loncu (otprilike 1.2 m dubine) (Gilchrist, 1989; Gojić, 2006).

Kako je već rečeno u prethodnom poglavlju, za primenu M1 načina modelovanja, potrebno je poznavati fizički zakon kojem se razmatrani sistem pokorava. U ovom slučaju u pitanju je bio dobro poznati zakon fizičke hemije: Sieverts – ov zakon (1929), koji daje osnovu za predikciju rastvorljivosti gasova u metalu. Takođe, za konstrukciju jednačine modela, potrebno je poznавanje termodinamike rastopa čelika kao i dinamiku fluida - brzine mehurova gasa u rastopu (Batchelor, 1967), koji se ponašaju prema Stokes-ovom zakonu (Stokes, George Gabriel, A Cambridge Alumni Database).

Postupak degazacije primenom vakuma i uduvavanja inertnog gasa odvija se tako što sniženjem pritiska iznad rastopa, primenom vakuma, dolazi do smanjenja i parcijalnog pritiska koji dovodi do izdvajanja rastvorenog vodonika u rastopu. Takođe, degazacija se odvija i nukleacijom i transferom mase unutar mehurova argona dispergovanih u rastopu. Polazni parametri tehnološkog procesa, definisani od strane naručioca projekta, značajni za modelovanje samog sistema bili su:

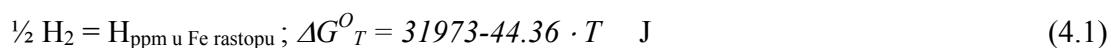
Sadržaj ugljenika u čeliku C	0.47 maseni%
Sadržaj sumpora u čeliku S	0.020 maseni%
Sadržaj fosfora u čeliku P	0.012 maseni%
Polazni sadržaj vodonika u čeliku	7 ppm
Konačna koncentracija vodonika u čeliku	1 ppm
Kapacitet livnog lonca	110 t
Temperatura na početku degazacije	1670 °C
Temperatura na kraju degazacije	1630 °C
Prvi nivo vakuumiranja	250 mbar
Najviši nivo vakuma	1 mbar

Matematički model, koji je trebalo razviti se odnosi na slučaj kontinualnog uduvavanja argona u rastop, kroz porozne elemente na dnu posude, što daje najbolje rezultate u nuklearskom protoku inertnog gasa u rastopu. Osnovne prepostavke (ograničenja) koja je trebalo uzeti u obzir pre definisanja matematičkog modela transfera mase u vanpećnoj degazaciji rastopa metala su (Zakharov, 2005):

- (a) Usled efekta mešanja mehurova gasa, koncentracija uklonjenog gasa je homogena u celoj zapremini metala (osim za slojeve na difuzionoj granici na površini gas-metal, koji ne učestvuju u mešanju);
- (b) Temperature metala se posmatra konstantnom po čitavoj zapremini u datom momentu vremena;
- (c) Na kontaktnoj površini gas-metal postignuta je termodinamička ravnoteža;
- (d) Mešanje gasova u mehurovima argona je idealno;

- (e) Uduvavanje argona u rastop se koristi da intenzivira agitaciju rastopa i za sakupljanje mehurova vodonika pomoću znatno većih mehurova argona. Argon se uduvava u rastop sa dovoljno visokim pritiskom da se anulira pritisak stuba metala, ipak, suviše visok pritisak može dovesti do kipenja rastopa;
- (f) Ne postoji dodatni (povratni) transfer gasa iz atmosfere u metal.

Samim time, teorijske osnove posmatranog procesa, na osnovu kojih je formirana jednačina modela su sledeće. Nukleacija gasovitih produkata je reakcija višeg reda sa veoma visokom energijom aktivacije. Pritisak mehura u rastopu je dat formulom $P=2\sigma/r$, gde je σ površinski napon a r je poluprečnik mehura gase. U rastopu čelika, usled velikog površinskog napona, ovaj pritisak je dosta visok. Na taj način, na 1600°C površinski napon u čeliku je $\sigma = 1.6 \text{ Nm}^{-1}$. Prema tome, gas u mehuru prečnika, npr 10^{-9} m , u rastupu čelika na 1600°C biće pod pritiskom od 32 atm ($2 \times 1.6/10^{-9} = 3.2 \times 10^9 \text{ N/m}^2 = 32 \text{ atm}$). Primenom zakona idealnih gasova $P \cdot V = n \cdot R \cdot T$ (Clapeyron, 1834), gde je $R = 8.314 \text{ J/mol K}$ (univerzalna gasna konstanta), može se izračunati za mehur ove dimenzije na 1600°C da je $n = 8.72 \times 10^{-22}$ mola, što odgovara broju od 525 molekula gase (Gilchrist, 1989). Takva akumulacija molekula može biti sasvim dovoljna za formiranje stabilnih nukleusa sposobnih za dalji rast u zasićenom rastvoru gase u metalu. Ipak, treba imati u vidu da je unutrašnji pritisak u tako malom mehuru suviše veliki da dopusti molekulima gase da ulaze u mehur iz okolnog rastopa, pri normalnim industrijskim uslovima. U slučaju vodonika prisutnog u rastopu čelika, u industrijskim uslovima, uobičajna koncentracija je 2-10 ppm. Sama reakcija po kojoj se odvija rastvaranje vodonika u rastopu čelika je (Gilchrist, 1989):



na 1670°C (1943 K) $\Delta G^{\circ}_{1943} = -54218 \text{ J}$

$$\text{tako da je } \ln k_{1873} = \frac{-\Delta G^{\circ}_T}{RT} = 3.356 \quad \text{i} \quad k = \frac{\text{ppm H}}{\sqrt{p_{H_2}}} = 28.68 \quad (4.2)$$

ili ravnotežni pritisak

$$\text{ppm H} = 28.68 \cdot \sqrt{p_{H_2}} \quad (\text{Sievertsov zakon}) \quad (4.3)$$

Ukupni pritisak u mehuru gasa, u rastopu čelika, je suma spoljašnjeg pritiska atmosfere p_a , pritiska stuba metala iznad mehura p_{Fe} , i površinskog pritiska $2\sigma/r$, odnosno:

$$p_{total} = p_a + p_{Fe} + 2\sigma/r \quad (4.4)$$

$$\text{gde je: } p_{Fe} = \rho \cdot g \cdot h \quad (4.5)$$

Maksimalna dubina rastopa čelika u loncu (unutrašnja dubina lonca), definisana uslovima projekta, i iznosi $h = 4$ m, specifična težina čelika na 1670°C je $\rho = 6823 \text{ kg/m}^3$. Inače, specifična težina rastopa čelika, napred navedenog sastava, u funkciji vremena se može predstaviti sledećom jednačinom (Li, 2005):

$$\rho = 6.9625 - 8.3422 \times 10^{-4} (T - 1776) \quad (4.6)$$

Da bi mehuru gasa postalo moguće da se kreće naviše kroz stub rastopa metala, neophodno je da unutrašnji pritisak u mehuru bude viši od ukupnog pritiska definisanog jednačinom 4.4. Dimenzije takvog mehura se mogu izračunati na osnovu jednačine: $r = 2\sigma/p_{total}$.

Brzina kretanja mehura gasa, pod napred navedenim uslovima u rastopu, se može opisati Stokesovim zakonom (Batchelor, 1967):

$$w = \frac{(2 \cdot r)^2 \cdot (\rho - \rho_g) \cdot g}{18 \cdot \mu} \quad (4.7)$$

Gde su, pored već definisanih simbola, : ρ_g – specifična težina argona, g – ubrzanje sile zemljine teže i μ dinamički viskozitet rastopa čelika.

Obzirom da se jednačinom 4.7 može izračunati brzina kretanja mehura gasa, i uvezši u obzir da je poznata polazna dubina lonca sa rastopom, te da se uslovi u sistemu menjaju linerno kao gradijent visine stuba rastopa metala, promena uslova se diferencijalno menja sa kretanjem mehura ka površini. Primenom sistema jednačina 4.1 – 4.7 i njihovim diferenciranjem po dužini putanje koju mehur prelazi, bilo je moguće izračunati vreme neophodno za uklanjanje vodonika iz rastopa čelika.

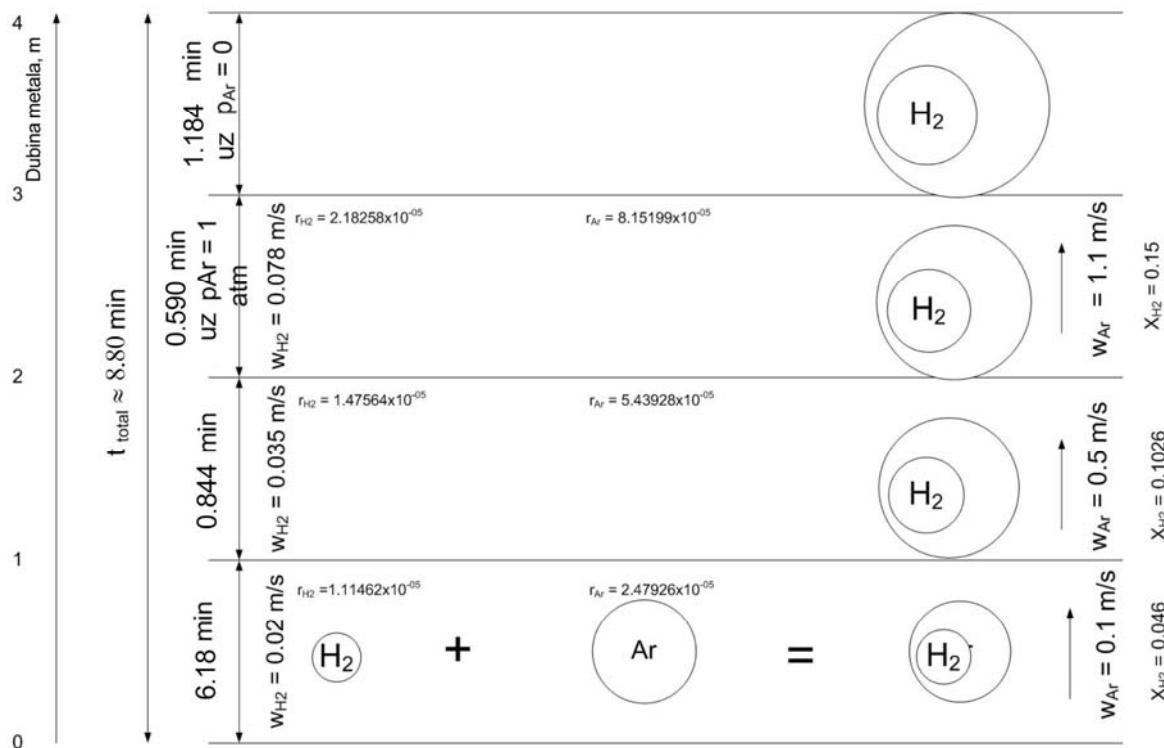
Na taj način, tačan proračun vremena neophodnog za uklanjanje argona može se izvesti upotrebom segmentalnog prostupa, za segmente visine stuba metala od 0.1 m. Na taj način, za projektom definisanoj polaznoj koncentraciji vodonika u rastopu od 7 ppm i temperaturu od 1670°C , rezultati proračuna su predstavljeni u tabeli 4.1.

Tabela 4.1. Vreme neophodno za uklanjanje vodonika iz rastopa čelika

Pritisak argona, atm	Dubina rastopa, m	p_{Fe} , atm	P_{total} , atm	r, m	t, min
1.5	4	2.772844	1.273831	2.48E-05	1.039092
1.5	3.9	2.703523	1.20451	2.62E-05	0.929076
1.5	3.8	2.634202	1.135189	2.78E-05	0.825214
1.5	3.7	2.564881	1.065868	2.96E-05	0.727507
1.5	3.6	2.495559	0.996546	3.17E-05	0.635954
1.5	3.5	2.426238	0.927225	3.41E-05	0.550556
1.5	3.4	2.356917	0.857904	3.68E-05	0.471312
1.5	3.3	2.287596	0.788583	4E-05	0.398222
1.5	3.2	2.218275	0.719262	4.39E-05	0.331287
1.5	3.1	2.148954	0.649941	4.86E-05	0.270507
1.5	3	2.079633	0.58062	5.44E-05	0.215881
1.5	2.9	2.010312	0.511299	6.18E-05	0.16741
1.5	2.8	1.940991	0.441978	7.15E-05	0.125093
1.5	2.7	1.87167	0.372657	8.47E-05	0.08893
1.5	2.6	1.802348	0.303335	0.000104	0.058922
1.5	2.5	1.733027	0.234014	0.000135	0.035068
1.5	2.4	1.663706	0.164693	0.000192	0.017369
1.5	2.3	1.594385	0.095372	0.000331	0.005825
1.5	2.2	1.525064	0.026051	0.001212	0.000435
1	2.1	1.455743	0.45673	6.91E-05	0.133583
1	2	1.386422	0.387409	8.15E-05	0.09611
1	1.9	1.317101	0.318088	9.93E-05	0.064792
1	1.8	1.24778	0.248767	0.000127	0.039629
1	1.7	1.178459	0.179446	0.000176	0.02062
1	1.6	1.109138	0.110125	0.000287	0.007766
1	1.5	1.039816	0.040803	0.000774	0.001066
0.5	1.4	0.970495	0.471482	6.7E-05	0.142351
0.5	1.3	0.901174	0.402161	7.85E-05	0.103569
0.5	1.2	0.831853	0.33284	9.49E-05	0.070942
0.5	1.1	0.762532	0.263519	0.00012	0.044469
(0) prekid uduvavanja Argona					
0	1	0.693211	0.694198	4.55E-05	0.308601
0	0.9	0.62389	0.624877	5.05E-05	0.250046
0	0.8	0.554569	0.555556	5.68E-05	0.197645
0	0.7	0.485248	0.486235	6.5E-05	0.151399
0	0.6	0.415927	0.416914	7.58E-05	0.111307
0	0.5	0.346605	0.347592	9.09E-05	0.07737
0	0.4	0.277284	0.278271	0.000113	0.049587
0	0.3	0.207963	0.20895	0.000151	0.027959
0	0.2	0.138642	0.139629	0.000226	0.012485
0	0.1	0.069321	0.070308	0.000449	0.003165
Ukupno vreme, min					8.808122

Na osnovu dobijenih rezultata proračuna, očigledno je da se regulacija i promena pritiska argona mora raditi tokom celog procesa kako bi se izbeglo ekstenzivno kipanje rastopa i oštećenje poklopca vakuum komore. Puma za ubrizgavanje argona se treba da isključi nakon 7.25 minuta i naknadna degazacija se odvija pod uticajem inercije mehurova gasa već prisutnih u rastopu.

Mehanizam uklanjanja vodonika, argonom i vakuumom, iz rastopa čelika je prikazan na slici 4.2.



Slika 4.2. Mehanizam uklanjanja rastvorenog vodonika iz rastopa čelika primenom argona i vacuum degazacije

Na osnovu Sievertsovog zakona (jednačina 4.3), sledi da je:

$$p_{H_2} = \left(\frac{H_{in Fe melt}}{28.68} \right)^2$$

Na osnovu toga, ukoliko je polazna koncentracija vodonika u rastopu 7 ppm, ravnotežni parcijalni pritisak vodonika je 0.059571 atm. Na taj način, smanjenje količine vodonika u metalu

ispod 7 ppm je moguće samo smanjenjem parcijalnog pritiska vodonika ispod 0.059571 atm. Na taj način, na npr. 2 m dubine u rastopu specifične težine 6823 kg/m^3 , pod vakuumom i uz uvođenje argona pod pritiskom od 1 atm, ravnotežni pritisak je 0.387 atm. Na taj način, mehur argona koji ne sadrži vodonik, može absorbovati vodonik do koncentracije koja je približno jednaka parcijalnom pritisku vodonika od 0.059571 atm.

$$\text{Na taj način, na osnovu jednačine: } p_{\text{H}_2} = X_{\text{H}_2} \cdot p_{\text{ukupno}} \quad (4.8)$$

$$\text{Sledi: } 0.059571 = X_{\text{H}_2} \cdot 0.387, \text{ odnosno: } x_{\text{H}_2} = 0.154, \text{ i } x_{\text{Ar}} = 1 - 0.154 = 0.846.$$

Obzirom da mehurovi putuju na gore, na manjim dubinama rastopa od površine, argón će težiti da apsorbuje nove porcije vodonika jer p_{ukupno} opada. Situacija za promenu dubine rastopa je predstavljena na slici 4.2.

S druge strane, obzirom da temperatura rastopa čelika opada, tokom procesa degazacije, menja se i specifična težina čelika prema jednačini 4.6. Ovo dovodi do promene vremena potrebnog za degazaciju. Da bi se dobio konačni model, koji u obzir uzima i promenu trajanja procesa, sa promenom specifične težine rastopa čelika usled hlađenja, prethodni proračun je ponovljen za različite temperaturu u intervalu od 1670°C do 1630°C . Konačna jednačina modela, kojom se može dobiti vreme trajanja procesa, u funkciji temeprature rastopa i dubine suda u kojem je smešten rastop je:

$$fct t(T,h) = a \cdot T^3 + b \cdot h^3 + c \cdot T \cdot h^2 + d \cdot T^2 \cdot h + e \quad (4.9)$$

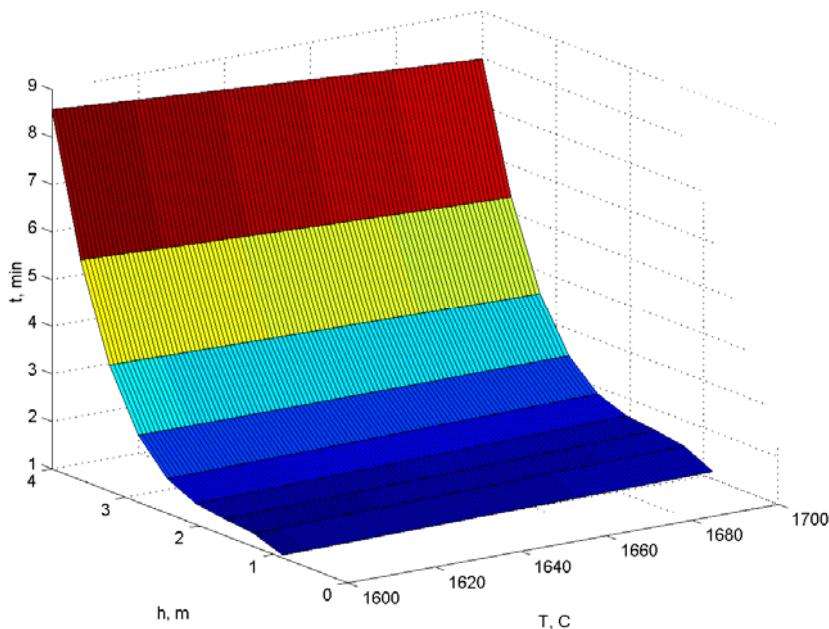
Gde je: t – vreme, T – temperatura i h – dubina rastopa metala

Nakon tri iteracije fitovanja navedene jednačine modela, na rezultatima dobijenim proračunom, finalne vrednosti karakterističnih koeficijenata jednačine 4.9, su date u tabeli 4.2.

Tabela 4. 2. Vrednosti finalnih koeficijenata modela

parameter	vrednost	greška	zavisnost
a	-2.839971576e-10	1.609011538e-10	0.9993498711
b	0.5084748698	0.01540664542	0.9976913391
c	-0.001534889192	5.800523059e-05	0.9993053146
d	1.591500046e-06	6.226648891e-08	0.9978420429
e	0.1882817483	0.7203237641e-05	0.9993449367

Rezultati koji predstavljaju zavisnost vremena procesa degazacije, proračunatog preko jednačine 4.9, za različite polazne temperature rastopa čelika i različite dubine lonca sa rastopom, su date na slici 4.3.



Slika 4.3. Vreme potrebno za uklanjanje vodonika iz rastopa čelika u funkciji temperature i dubine rastopa metala

Na osnovu prethodnog primera može se zaključiti sledeće, model degazacije čelika primenom vakuma i argona, razvijen je po principu M1 modelovanja, uz poznavanje fizičkog zakona koji opisuje prirodu navedenog sistema. U konkretnom slučaju u pitanju je Sieverts-ov zakon (1929). Takođe, definisani su termodinamika rastopa čelika kao i dinamika fluida mehurova gasa u rastopu (Batchelor, 1967), prema Stokes-ovom zakonu.

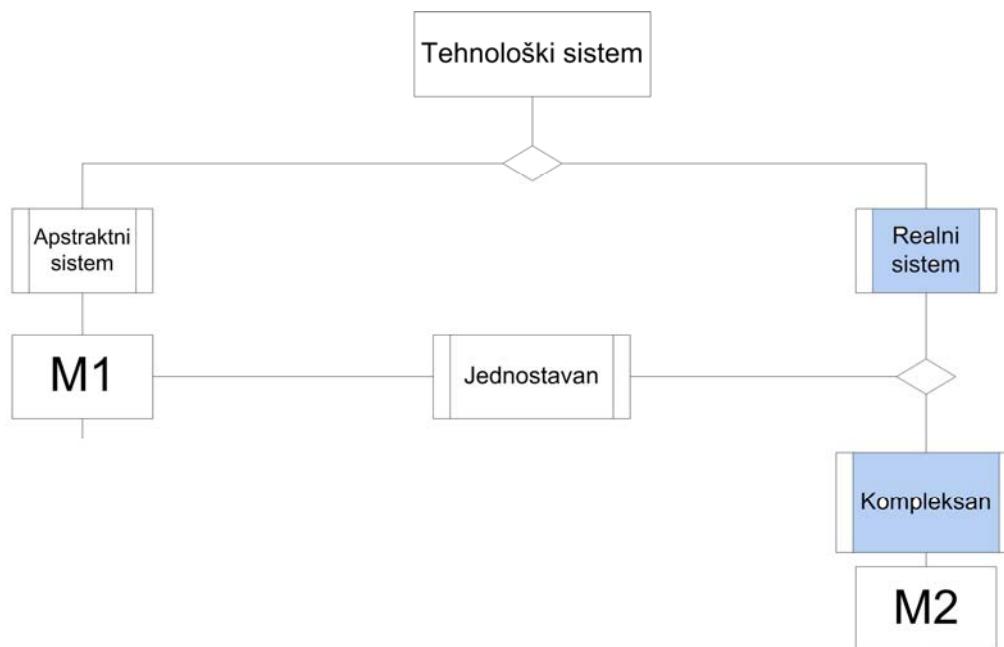
Na osnovu definisanog modela, bilo je moguće izračunati da je za polaznu koncentraciju vodonika od 7 ppm i temperaturu rastopa od 1670°C , koji je smešten u lonac dubine 4 metara i koji sadrži 110 tona metala, neophodno uduvavati argon sa polaznim pritiskom od 1.5 atm tokom 8.8 minuta, kako bi se koncentracija vodonika smanjila na željenih 1 ppm. Operaciju treba izvoditi pri povišenim vakuumom u sistemu od 1 mbar (Mihajlović et al., 2010). Na osnovu navedene jednačine modela dobijeni su optimalni uslovi rada, još na nivou simulacije. Potom je

izvršen dizajn navedenog postrojenja i njegova finalna konstrukcija. Postrojenje za vakuum degazaciju rastopa čelika je danas u funkciji u kompaniji Mittal Steel, Zenica (Bosna i Hercegovina)

Na osnovu prethodnog primera, očigledno je da je M1 način modelovanja potreno primeniti u cilju razvoja modela sistema na nivou apstrakcije. Takođe, ovaj način modelovanja se primenjuje i kod jednostavnijih realnih sistema kao što je prikazano u brojnim radovima (Đurić et al., 2010a; Sluiter, 2012; De la Calle et al., 2014; Shang et al., 2014, i mnogi drugi). O ograničenjima M1 načina modelovanja više će biti rečeno u narednom poglavlju, prilikom razvoja i diskusije algoritma razvijenog za selekciju adekvatnog načina matematičkog modelovanja realnih tehnoloških sistema.

4.2. Praktični primeri M2 pristupa modelovanju

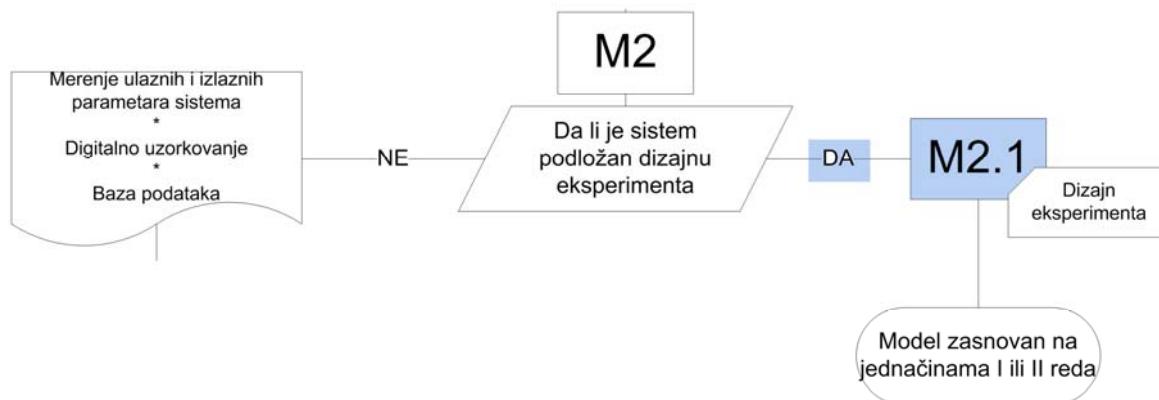
Ukoliko je neophodno modelovati realan tehnološki sistem, koji je uz to po svojim parametrima i kompleksan, tada je često logičnije primeniti M2 umesto M1 pristupa modelovanju. Odluka u polaznom algoritmu za slučaj ovakvih sistema data je na slici 4.4.



Slika 4.4. Izbor M2 pristupa modelovanju kompleksnih realnih sistema

Kako je već naglašeno u prethodnom tekstu, M2 pristup modelovanju se zasnova na većim bazama podataka koje sadrže vrednosti ulaznih parametara i rezultujućih izlaznih veličina istraživanih sistema. Potpuno poznavanje fizičkih zakona koji karakterišu dati sistem je poželjno ali nije neophodno za razvoja modela po M2 principu. Podaci o razmatranom sistemu se dobijaju na osnovu eksperimenta. Eksperiment može biti ostvaren simulacijom rada realnog sistema u laboratorijskim uslovima (dizajn eksperimenta) ili merenjem na realnom sistemu u uslovima njegovog svakodnevnog rada.

Prema tome, sledeća odluka koju donosi laci odluke o najoptimalnijem načinu modelovanja treba da doneše je o tome da li je sistem podložan predefinisanom dizajnu eksperimenta ili nije. Ukoliko je odgovor „da“ tada se dalje modelovanje upravo zasniva na prethodnom dizajnu eksperimenta (Slika 4.5). Sam dizajn eksperimenta se može bazirati na tehnikama kao što su npr. faktorski eksperimentalni dizajn ili Taguči metod (Taguchi, 1992; Kilickap, 2010). Ovakav način modelovanja će u daljem tekstu biti definisan kao M2.1.



Slika 4.5. Odluka o primenjivosti dizajna eksperimenta u analizi sistema

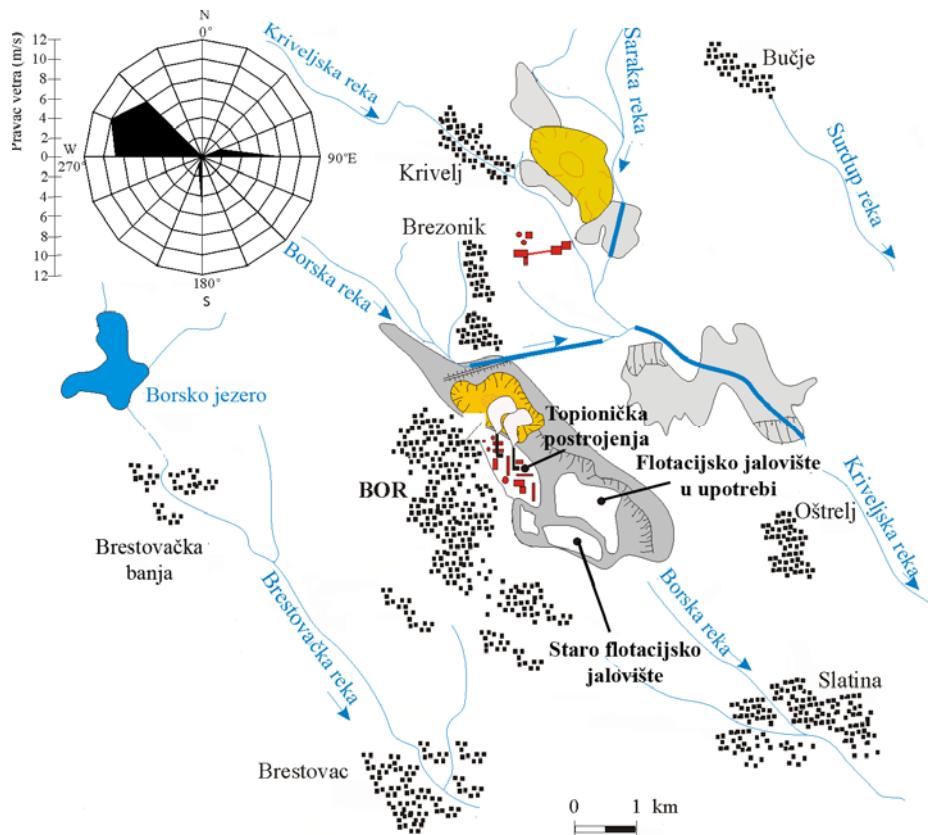
Kao primer primene M.2.1. načina modelovanja biće predstavljen razvoj jednačine matematičkog modela u cilju određivanja optimalnih uslova za izdvajanje bakra iz jalovinskog materijala deponovanog nakon procesa flotacije (Mihajlović et al., 2012).

Razlog za formiranjem optimizacionog modela ovog sistema se nalazi u tome što jalovina procesa flotacije, nastala kao nus produkt pirometalurške proizvodnje bakra, sadrži još uvek značajnu količinu Cu uz određeni sadržaj drugih – potencijalno opasnih elemenata kao što su: Fe, Sn, Sb, As, i Pb. Ovaj materijal se obično odlaže na otvorenim jalovištima, u neposrednoj blizini same topionice bakra. Teški metali koji se iz jalovine mogu oslobođiti i preći u vodu i

zemljište mogu izazavati veliki broj ekoloških problema (Kersch et al., 2004; Antonijevic et al., 2008). Samim time, ovaj materijal je klasifikovan kao opasan otpad direktivom Evropske Unije za integrисану prevenciju zagađenja (EU Directive 96/61/EC), kao i direktivom o otpadu rudarenja (EU Directive 2006/21/EC).

S druge strane, sadržaj bakra u jalovini je obično dovoljno veliki da bi se mogao izdvojiti ekonomski opravdano, upotrebom adekvatne metodologije. Količina ovog materijala je takođe veoma velika, tako da predstavlja veliku alternativnu sirovinsku bazu. Naime, na osnovu Gorai i Jana (2003) na svaku tonu proizvedenog bakra nastaje 2.2 tone flotacijske jalovine. Dalje, svake godine nastane približno 24.6 miliona tona jalovine od svetske proizvodnje bakra (Habashi, 2009).

U ovom istraživanju, izvršen je pokušaj izdvajanja bakra iz jalovine flotacije nastale u kompaniji RTB Bor i deponovane na flotacijskom jalovištu. Sam proces flotacije predstavlja važni stadijum u transformaciji rude bakra u koncentrat, koji je pogodan za dalju operaciju pirometalurškog tretmana (topljenje), i kao takav se ne može izbeći. Rude u savremenoj ekstrakciji bakra obično sadrže nizak sadržaj Cu, oko 0.5%, i samim time zahtevaju flotaciono obogaćivanje da bi se dobili koncentrati sa preko 20% Cu (Đurić et al., 2010b). Da bi se smanjio uticaj transportnih troškova, u ukupnim troškovima proizvodnje, postrojenja za flotaciju se obično lociraju blizu topionica. Iz istog razloga, flotaciona jalovišta su takođe locirana blizu postrojenja topionice. Ovo je takođe bio i slučaj sa flotacijskim jalovištem u Boru koje je, usled činjenice da je topionica smeštena blizu centra grada, takođe locirano blizu samog centra grada Bora. U ovom gradu je jalovište na neki način granica između urbane i industrijske zone (Slika 4.6).



Slika 4.6. Lokacija flotacionog jalovišta blizu grada Bora (Mihajlović et al., 2012)

Rudarenje bakra u Boru je počelo pre više od 100 godina, tačnije 1903. godine. Površinski kop u Boru je otvoren 1912. godine i korišćen je do 1986. godine. Grad bor je sagrađen nakon početka rudarsko – metalurške proizvodnje bakra, u samoj blizini rudnika i topionice. U gradu živi blizu 40,000 ljudi, dok još oko 20,000 ljudi živi u ruralnom delu grada, koji su izloženi potencijalnoj opasnosti od akumuliranog industrijskog otpada.

Imajući u vidu da je flotacijska jalovina akumulirana u ranijem periodu, bez bilo kakve obrade, procenjuje se da se na ovom jalovištu nalazi blizu 10^9 tona ovog materijala (Đurić et al., 2010). Takođe, utvrđeno je da je prosečni sadržaj bakra u ovom materijalu 0.24% (Mihajlović et al., 2012). Obzirom da je ovaj materijal razliven na velikoj površini i obzirom na pravac veta (Slika 4.6), prašina sa ove lokacije u formi $PM_{2.5}$ i PM_{10} se transferuje na urbani deo grada ali i ka oblasti poljoprivrednog zemljišta u ruralnom delu grada. Ovakva lokacija grada predstavlja oblast veoma velikog rizika prema Evropskim standardima (LEAP, 2003; Dimitrijević et al., 2009). Istraživanja koja su sprovedena u prethodnom periodu (Mihajlović et al., 2010; Đurić et al., 2010; Nikolić et al., 2011) nedvosmisleno pokazuju da je ova oblast najzagađenija u

Jugoistočnoj Evropi. S druge strane, potpuna remedijacija celokupnog jalovišta zahteva bi suviše veliko investiciono ulaganje. Takođe, i brojni drugi rudnici u svetu se suočavaju sa problemom flotacionih jalovišta (Ciccu et al., 2003; Forsberg i Ledin, 2006; Bertocchi, 2006). Situacija postaje posebno kritična nakon zatvaranja rudnika. Najčešće, flotacijska jalovišta ostaju samo delimično stabilizovana, predstavljajući veliki ekološki hazard (Benvenuti, 1997; Bryan, 2009).

Imajući u vidu navedenu situaciju, nekoliko tehnoloških metoda je predloženo da bi se smanjio ili eleminisao problem koji se javlja kod flotacionih jalovišta (Pelino et al., 2004; Coruh i Orgun, 2006; Đurić et al., 2010b; Coruh, 2011). Većina navedenih istraživanja se bavila hidrometalurškim tretmanom jalovinskog materijala u cilju izdvajanja preostalih korisnih materijala.

Istraživanje koje je predstavljeno ovde, kao polaznu osnovu je uzelo iskustvo prethodnih istraživača, u cilju formiranja dizajna eksperimenta za dobijanje optimalnih uslova ekstrakcije bakra iz jalovinskog materijala. Imajući u vidu visoku cenu bakra na svetskom tržištu (www.infomine.com) ovo bi garantovalo dodatni prihod koji bi se delimično mogao iskoristiti za remedijaciju i bezbedno uklanjanje finalnog jalovinskog materijala nakon obrade.

Sam metod istraživanja zasniva se na dizajnu eksperimenta primenom metoda faktorskog eksperimentalnog dizajna u cilju dobijanja matematičkog modela koji će uključivati sve važne faktore procesa u isto vreme. Najvažniji eksperimentalni faktori i mogući opseg svake eksperimentalne promenjive, kao polazna osnova procedure modelovanja, zasnovani su na literaturnom pregledu i prethodnim eksperimentima. Uz upotrebu faktorskog eksperimentalnog dizajna, moguće je dizajnirati eksperimentalnu postavku uz optimalne uslove procesa koji mogu dovesti do maksimalnog iskorišćenja bakra iz jalovinskog materijala.

U proceduri eksperimentalnog dizajna postoje tri značajna koraka. Ovi koraci su: statistički dizajn optimalnih uslova istraživanog procesa, estimacija koeficijenata modela uz predviđanje odziva i statistička analiza. Najčešće korišćen eksperimentalni dizajn, za predviđanje osnovnih efekata i interakcije efekata faktora procesa, u današnje vreme je 2^n faktorski dizajn. U ovom pristupu, svaka varijabla (X_i , $i=1 \dots n$) se ispituje na minimum dva novoa (Montgomery, 1976; Sayen and Bayramogly, 2001).

Kako broj faktora (n) raste, raste i broj iteracija za kompletну replikaciju dizajna. Samo modelovanje sistema može se ostvariti upotreboru modela prvog reda, definisanog jednačinom (Mihajlović et al., 2011; Mihajlović et al., 2012):

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i x_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j>1}^n b_{ij} x_i x_j \quad (4.10)$$

Ili modelom drugog reda, koji je:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i x_i + \sum_{i=1}^n b_{ii} (x_i^2 - \bar{x}_i^2) + \sum_{i=1}^n \sum_{j>1}^n b_{ij} x_i x_j \quad (4.11)$$

Gde je:

$$\bar{x}_i^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 \quad (4.12)$$

U jednačini (4.12) N predstavlja ukupni broj eksperimenata, uključujući ponovljene (“holdout”) eksperimentalne postavke.

Na taj način, uz sledeću aproksimaciju:

$$b_0' = b_0 - \sum_{i=1}^n b_{ij} \bar{x}_i^2 \quad (4.13)$$

Model drugog reda se može predstaviti kao:

$$y = b_0' + \sum_{i=1}^n b_i x_i + \sum_{i=1}^n b_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^n \sum_{j>1}^n b_{ij} x_i x_j \quad (4.14)$$

Predviđanje tačnosti razvijenog modela (kako prvog tako i drugog reda) može se postići upotrebom korena srednje kvadratne greške (“root means squared error - RMSA”) proračunate između predviđanja modela i eksperimentalno dobijenih vrednosti izlaznih veličina, primenjeno na “holdout” slučajeve koji su dodati eksperimentalnom planu upravo za procenu čiste greške eksperimenta.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{m_o} \cdot \sum_{i=1}^{m_o} (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (4.15)$$

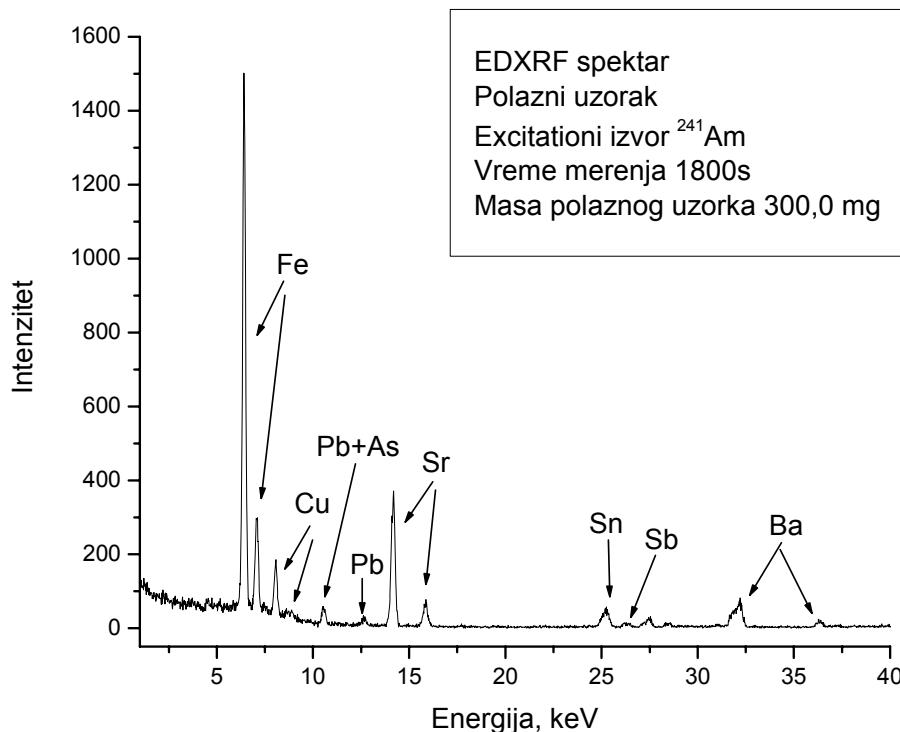
Gde su \hat{y}_i predviđanja modela a y_i su stvarne vrednosti izlaznih varijabli, m_o je broj “holdout” slučajeva.

Kako bi se eksperiment sproveo, potrebno je obezbediti reprezentativne uzorke razmatranog polaznog materijala. Uzorci su dobijeni bušenjem na dubinu od 10 metara ispod površine jalovišta. Proces uzorkovanja organizovao je Institut za rudarstvo i metalurgiju u Boru, tokom 2010. Godine, u okviru projekta TR34023. Nakon pripreme uzorka izvršena je hemijska, granulometrijska, EDXRF (energy dispersive X-ray fluorescence) i ICP-AES analiza, u cilju njihove karakterizacije. Prosečni hemijski sastav uzorka je dat u tabeli 4.3.

Tabela 4.3. Hemijska karakterizacija uzorka flotacijske jalovine

Komponenta	Koncentracija
Cu _{cum} (%)	0.24
Cu _{ox} (%)	0.05
Cu _{sulf} (%)	0.235
S (%)	10.56
As (%)	0.026
Pb (%)	0.003
Sn (%)	0.0071
Sb (%)	0.003
Ba (%)	0.0048
Sr (%)	0.011
SiO ₂ (%)	56.72
Al ₂ O ₃ (%)	12.64
Fe (%)	8.65
CaO (%)	0.95
MgO (%)	0.052
Au (g/t)	0.1
Ag (g/t)	1.1

Rezultati EDXRF analize uzorka su predstavljeni na slici 4.7.



Slika 4.7. EDXRF spektar polaznog uzorka flotacijske jalovine

Eksperimenti izdvajanja bakra su se odvijali tako što su uzorci flotacijske jalovine mase 50g mešani sa sumpornom kiselinom (H_2SO_4) sa različitim odnosom Č:T (Tabela 4.4). Mala količina vode (7 do 10 ml) je dodavana uzorcima kako bi se dobio oblik pulpe. Pripremljeni uzorci su potom smeštani u keramičke posude i zagrevani na temperature od 25 do 250°C (proces sulfatizacionog prženja). Vremenski intervali sulfatizacije varirali su prema nivoima predstavljenim u Tabeli 4.4. Nakon sulfatizacije, uzorci su luženi u vodi, u staklenom reaktoru od 1000 ml, opremljenim sa mehaničkom mešalicom. Odnos čvrsto tečno (Č:T), vremenski intervali, temperatura luženja i brzine agitacije su u opsezima datim u tabeli 4.4.

Na osnovu tabele 4.4, može se videti da je odabранo osam karakterističnih parametara (faktora) razmatranog procesa: odnos sirovog materijala prema kiselini – čvrsto:tečko (varijabla X_1); temperatura sulfatizacije (varijabla X_2); vreme trajanja sulfatizacije (varijabla X_3); odnos čvrsto: tečno tokom luženja u vodi (varijabla X_4); temperatura luženja (varijabla X_5); vreme luženja (varijabla X_6); brzina mešanja – agitacija (varijabla X_7) i molarna koncentracija sumporne

kiseline (varijabla X_8). Najviši, srednji i niži nivo svih faktora je predstavljen u tabeli 4.4. Podaci o opsezima navedenih faktora su dobijeni istraživanjem dostupne literatura.

Tabela 4.4. Faktorski nivoi najznačajnijih parametara procesa

Faktori	Visok nivo (+)	Srednji nivo (0)	Nizak nivo (-)
Odnos Čvrsto-Tečno tokom sulfatizacije (X_1)	100 : 1	50 : 1	10 : 1
Temperatura sulfatizacije, $^{\circ}\text{C}$ (X_2)	250	150	25
Vreme sulfatizacije, h (X_3)	12	6	1
Odnos Čvrsto-Tečno tokom luženja (X_4)	1 : 1	1 : 2	1 : 4
Temperatura luženja, $^{\circ}\text{C}$ (X_5)	80	50	25
Vreme luženja, min (X_6)	60	40	20
Brzina mešanja, O/min (X_7)	600	300	100
Molarna koncentracija H_2SO_4 , M (X_8)	1.5	1	0.4

Uz osam faktora i tri faktorska nivoa (Tabela 4.4), ukupno moguć broj eksperimentalnih postavki je $3^8 = 6561$, međutim dovoljan broj eksperimenata (plan eksperimenata) prema faktorskom eksperimentalnom dizajnu je određen upotrebom SPSS softvera (SPSS v. 18). Proračunati faktorski eksperimentalni dizajn se sastojao od 27 eksperimentalnih postavki uz dodatih 6 "holdout" slučajeva (Tabela 4.5). Eksperimenti su urađeni po slučajnom redosledu kako bi se izbegla sistemska greška. Nakon sprovedenih svih 33 eksperimenata, rezultati ekstrakcije bakra su uključeni u bazu podataka kao izlazna varijabla – Y (Tabela 4.5). Potom je samo modelovanje sprovedeno na prvih 27 eksperimenata, uz upotrebu modela prvog reda (jednačina 4.10). Nakon toga je izvršena analiza statističke značajnosti dobijenih koeficijenata jednačine modela. Vrednosti dobijenih koeficijenata jednačine modela, koji imaju statističku značajnost ($p < 0.01$) su predstavljeni u Tabeli 4.6.

Tabela 4.5. Eksperimentalni dizajn i dobijeno izluženje bakra

Exp. br	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆	X ₇	X ₈	Izluženje bakra, %
1	-	0	+	-	0	+	+	+	6.30
2	0	+	+	-	+	-	-	0	13.04
3	+	+	0	+	-	0	-	+	5.17
4	-	-	+	+	-	-	-	0	2.43
5	+	0	0	0	+	+	0	0	2.61
6	+	-	+	-	-	0	0	-	7.51
7	-	0	-	-	-	-	0	+	5.61
8	0	+	+	-	-	+	0	0	4.35
9	0	0	0	+	+	-	+	-	2.52
10	-	0	0	-	+	0	-	+	3.91
11	-	+	-	-	0	0	+	0	64.17
12	0	-	0	0	0	0	-	+	2.17
13	0	-	-	0	+	-	0	+	2.26
14	+	0	+	0	0	-	-	0	3.04
15	-	-	0	+	0	+	0	0	2.43
16	-	+	+	0	+	0	0	-	19.13
17	0	-	+	0	-	+	+	+	8.61
18	+	0	-	0	-	0	+	0	2.87
19	-	0	-	+	-	+	-	-	4.87
20	+	-	0	-	0	-	+	-	2.39
21	-	+	-	+	+	0	+	0	2.61
22	-	+	+	-	+	+	0	+	89.57
23	-	-	-	0	0	+	-	-	2.96
24	+	+	-	-	+	+	-	-	2.39
25	-	+	0	0	-	-	+	-	1.74
26	-	0	-	+	0	-	0	+	2.87
27	+	+	+	+	0	0	0	-	3.13
28 ^a	0	+	0	-	-	-	0	0	2.83
29 ^a	-	+	-	0	-	-	+	0	23.48
30 ^a	0	-	0	-	0	-	+	0	15.61
31 ^a	0	-	-	-	+	+	0	0	62.39
32 ^a	0	0	-	0	0	0	-	-	13.57
33 ^a	0	-	+	-	+	0	+	+	22.83

a – "holdout" eksperimenti

Tabela 4.6. Koeficijenti jednačine modela prvog reda procesa ekstrakcije bakra iz flotacijske jalovine

Model	β – nestandardizovano	Standardna greška (SD)	β - standardizovan	t	Statistička značajnost (p)
konstanta	-30.513	18.319		-3.29	0.004
X_1	-0.401	0.4	-3.2	-4.119	0.001
X_5	0.743	0.456	2.226	4.114	0.001
X_6	0.819	0.304	1.409	5.14	0.000
X_1X_2	-0.001	0.001	-1.509	-3.097	0.007
X_1X_5	-0.002	0.004	-1.125	-2.394	0.028
X_2X_4	-0.219	0.089	-1.772	-4.954	0.000
X_2X_5	0.004	0.002	2.718	5.457	0.000
X_2X_8	0.075	0.052	0.642	1.972	0.065
X_3X_4	5.215	2.209	2.075	5.01	0.000
X_3X_6	-0.108	0.062	-3.123	-4.264	0.001
X_3X_7	0.002	0.003	1.888	3.000	0.008
X_3X_8	0.793	1.162	-0.928	-2.544	0.021
X_5X_8	0.314	0.229	1.714	4.067	0.001

Zasnovano na rezultatima predstavljenim u tabeli 4.6., dobijenim regresionom analizom, dobijena je sledeća jednačina modela procesa:

$$Y = -30.513 - 0.401 \cdot X_1 + 0.743 \cdot X_5 + 0.819 \cdot X_6 - 0.001 \cdot X_1X_2 - 0.002 \cdot X_1X_5 - 0.219 \cdot X_2X_4 + 0.004 \cdot X_2X_5 + 0.075 \cdot X_2X_8 + 5.215 \cdot X_3X_4 - 0.108 \cdot X_3X_6 + 0.002 \cdot X_3X_7 - 0.793 \cdot X_3X_8 + 0.314 \cdot X_5X_8 \quad (4.16)$$

Na osnovu koeficijenata jednačine (4.16), moguće je analizirati regresionu jednačinu i odrediti efekat svakog od faktora. Sama jednačina predstavlja potencijalne efekte svakog od osam parametara. Ukoliko se posmatraju samo nestandardizovani koeficijenti (β – nestandardizovan u tabeli 4.6), vreme luženja (X_6) ima najjači uticaj na odziv sistema jer je odgovarajući koeficijenat ($b=0.819$) veći od svih ostalih linearnih koeficijenata. Pozitivan znak ovog koeficijenta indicira da porast vremena luženja dovodi do porasta izluženja bakra iz flotacione jalovine. Drugi značajan faktor je temperatura luženja (X_5 uz $b=0.743$). Ovaj koeficijent takođe ima pozitivn predznak i indicira da porast temperatura luženja vodi ka boljem izluženju bakra. S druge strane, odnos čvrsto prema tečno tokom sulfatizacije (X_1) ima negativni uticaj na izdvajanje bakra ($b = -0.401$), što je i očekivano. Ortogonalni dizajn eksperimenta takođe može dati procenu interakcije

razmatranih faktora procesa. Najjača interakcija je između vremena sulfatizacije (X_3) i odnosa čvrsto:tečno tokom luženja (X_4), čiji je koeficijent 5.215. Ipak, ukoliko se analiziraju koeficijenti dobijeni nakon standardizacije ulaznih veličina (β - standardizovano u Tabeli 4.6), koja uklanja efekat intenziteta vrednosti različitih varijabli; situacija je donekle različita. Sama standardizacija je izvršena preko $(X_i - \text{min}) / (\text{max} - \text{min})$. Za standardizovane uzorka glavni efekat ima odnos čvrsto:tečno tokom sulfatizacije (X_1). Takođe, interakcije između vremena sulfatizacije (X_3) i vremena luženja (X_6) imaju najveći efekat na izluženje bakra od svih kombinovanih varijabli. Ipak, obzirom na slične vrednosti t koeficijenata za gotovo sve istraživane faktore (Tabela 4.6), može se zaključiti da sve statistički značajne varijable imaju uticaja na ekstrakciju bakra iz flotacijske jalovine.

Interna validnost dobijenog modela je potom testirana upotreboru kontrolnih testova na 6 "holdout" slučajeva, predstavljenih u tabeli 4.5. Nakon kalkulacije RMSE preko jednačine 4.15, na ovih 6 "holdout" slučajeva, zaključeno je da su podaci dobijeni eksperimentom u dobrom slaganju sa predviđanjima modela. Potom je dalja pouzdanost modela testirana upotreboru ANOVA testova. Rezultati ANOVA testa razvijenog modela su predstavljeni u tabeli 4.7.

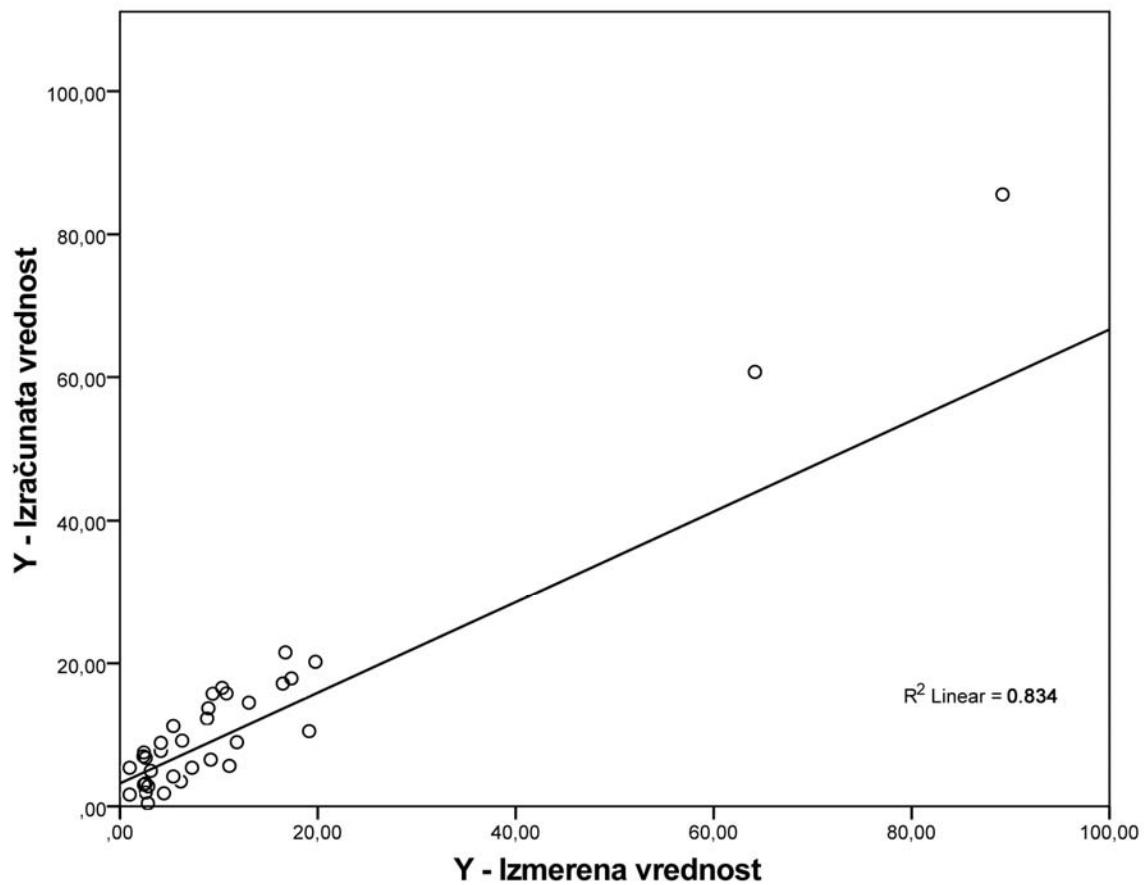
Tabela 4.7. Rezultati ANOVA testa finalno dobijenog modela prvog reda

	Suma kvadrata (Sum of squares)	Stepen slobode (df)	Srednja kvadratna vrednost (Mean square)	F	Značajnost (Significance)
Regresija (Regression)	11075.52	12	626.86	56.341	0.007
Ostatak (Residual)	2268.67	15	219.41		
Ukupno (Total)	13344.19	27			

Zavisna varijabla: Y

Značajna F statistika (Tabela 4.7) indicira da je upotreba modela bolja neko prepostavka prosečne vrednosti (Đurić et al., 2010c; Đorđević et al., 2010). Takođe, stepen značajnosti F statistike je manji od 0.05, što znači da varijacije objašnjene modelom nisu rezultat slučajnosti. Odnos regresije ka ostatku je 83%:17%, što potvrđuje da se 83% vrednosti zavisne varijable (Y) može objasniti modelom. Koeficijent determinacije finalnog modela je $R^2 = 0.834$, kako je predstavljeno na slici 4.8. Visoka vrednost R^2 indicira jaku zavisnost između izmerenih i modelom predviđenih vrednosti zavisne promenjive. Izračunata standardna greška procene

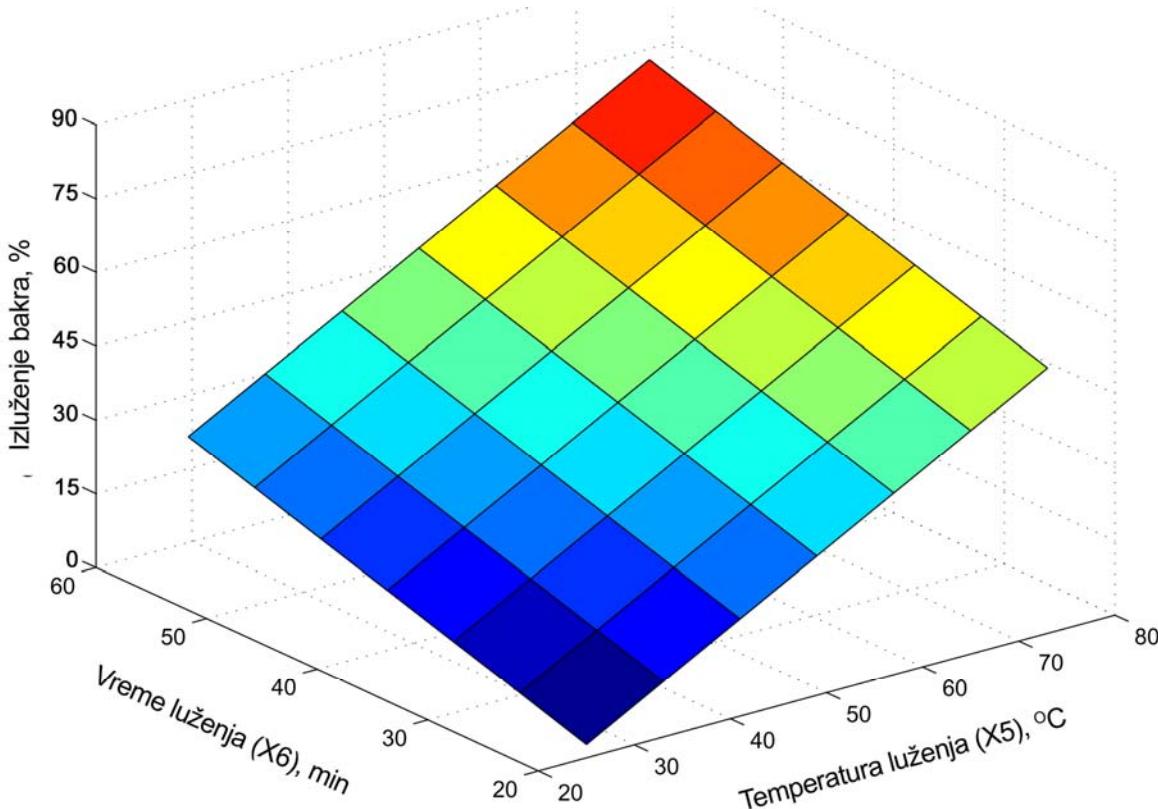
(Standard Error Estimate – SEE) za ovaj model ima vrednost 2.723. Prema tome, može se zaključiti da dobijeni model prvog reda može da se koristi za predviđanje ekstrakcije bakra iz flotacijske jalovine dovoljno tačno. Na taj način, razvoj eksperimentalnog plana modela drugog reda (jednačine 4.11 – 4.14), nije neophodan. Naime, model drugog reda zahtevao bi širi opseg istraživanih eksperimentalnih faktora (nezavisnih procesnih varijabli). Takođe, dizajn eksperimenta za jednačinu drugog reda obično zahteva pet nivoa umesto tri koji su razvijeni za model prvog reda (Tabela 4.4.). Samim time, to bi zahtevalo i dodatan set eksperimenata a to nije ekonomski opravdano.



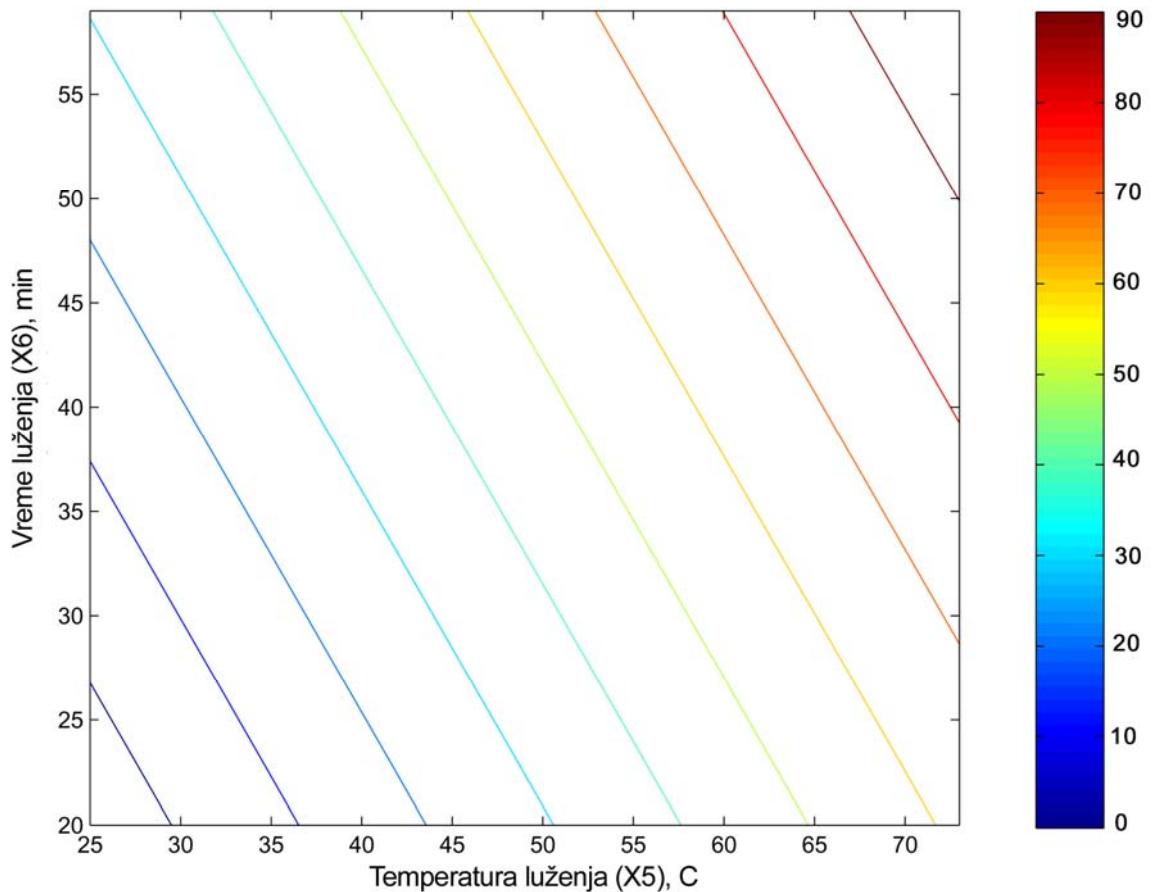
Slika 4.8. Korelacija između eksperimentalno određenih i modelom predviđenih vrednosti ekstrakcije bakra iz flotacijske jalovine (---- regresiona linija, o vrednosti izračunate upotrebom MLRA modela)

Upotrebom finalne jednačine modela (jednačina 4.16), koja predviđa iznos ekstrakcije bakra sa tačnošću 83.4%, moguće je odrediti optimalne uslove operativnog menadžmenta procesa dovoljno tačno. Optimizacija se sastoji od pronalaženja takvog seta vrednosti operativnih varijabli

koje će rezultovati optimalnom ekstrakcijom bakra. Lokalizacija optimalnog seta vrednosti operativnih varijabli može se dobiti na više načina (Oughlis-Hammache, 2010). Ipak, lejaut površinskih konturnih dijagrama je najjednostavniji način za interpretaciju, ukoliko se bazira na jednačini modela, što je ovde slučaj. Površinski konturni dijagrami su analizirani, upotrebom Matlab 7.0 softvera (Matlab 7.0) kako bi se odredilo optimalno rešenje. Odgovarajući površinski dijagram i konturni dijagrami su predstavljeni na slikama 4.9 i 4.10, respektivno. Formirani su u ravni: temperature luženja – vreme luženja, uz ostale varijable konstantne u vrednostima eksperimenta br. 22 iz tabele 4.5. Prema tome, ukoliko se odnos čvrsto : tečno tokom sulfatizacije (X_1) održava na 10:1; temperatura sulfatizacije (X_2) je 250°C ; vreme sulfatizacije (X_3) je 12 sati; odnos čvrsto:tečno tokom luženja (X_4) je 1:1; brzina mešanja (X_7) je $300^{\circ}/\text{min}$; i molarna koncentracija H_2SO_4 (X_8) je 1.5M, tada se može postići izluženje bakra od 90% ukoliko se flotacijska jalovina luži 60 minuta (X_6) na temperaturama iznad 70°C (X_5).



Slika 4.9. Odgovarajući površinski dijagram za optimalnu ekstrakciju bakra iz flotacijeke jalovine

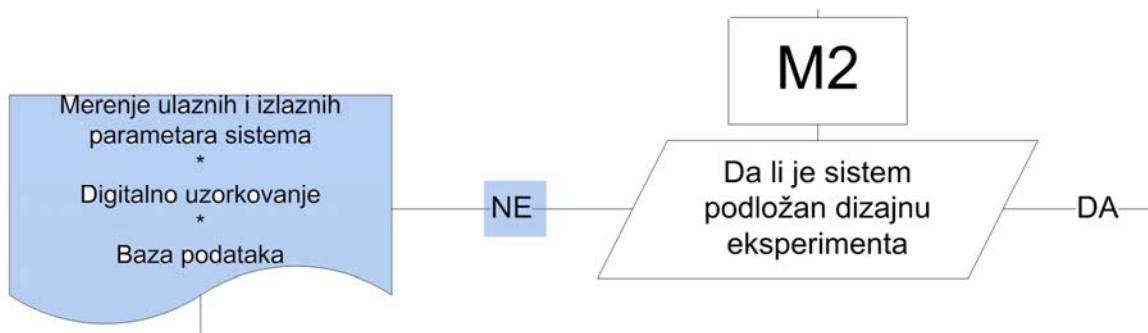


Slika 4.10. Odgovarajući konturni dijagram optimalnu ekstrakciju bakra iz flotacijeke jalovine

Na osnovu navedenog, može se istaći da je koristeći razvijenu numeričku jednačinu modela procesa (po metodologiji M2.1) izdvajanja bakra iz flotacijske jalovine, moguće definisati optimalne uslove ovog tehnološkog procesa. Takođe, moguće je vršiti predviđanje stepena izluženja u funkciji varijacije svakog od osam ključnih faktora procesa. Nivo tačnosti predviđanja je 83.4%.

Međutim, u najvećem broju slučajeva nije moguće vršiti dizajn eksperimenata za već postojeće tehnološke procese. Naime, ukoliko su to industrijski procesi koji funkcionišu u svom redovnom proizvodnom režimu, u okviru određene kompanije, malo je verovatno da se može dodatno eksperimentisati sa izmenjenim proizvodnim parametrima. Takođe, ponekad nije ekonomski opravdano raditi dizajn eksperimenata, čak i ukoliko realni uslovi to dozvoljavaju. Tada bi

odgovor na pitanje postavljeno na slici 4.5, svakako bio NE. U tom slučaju se dobija situacija predstavljena na slici 4.11.

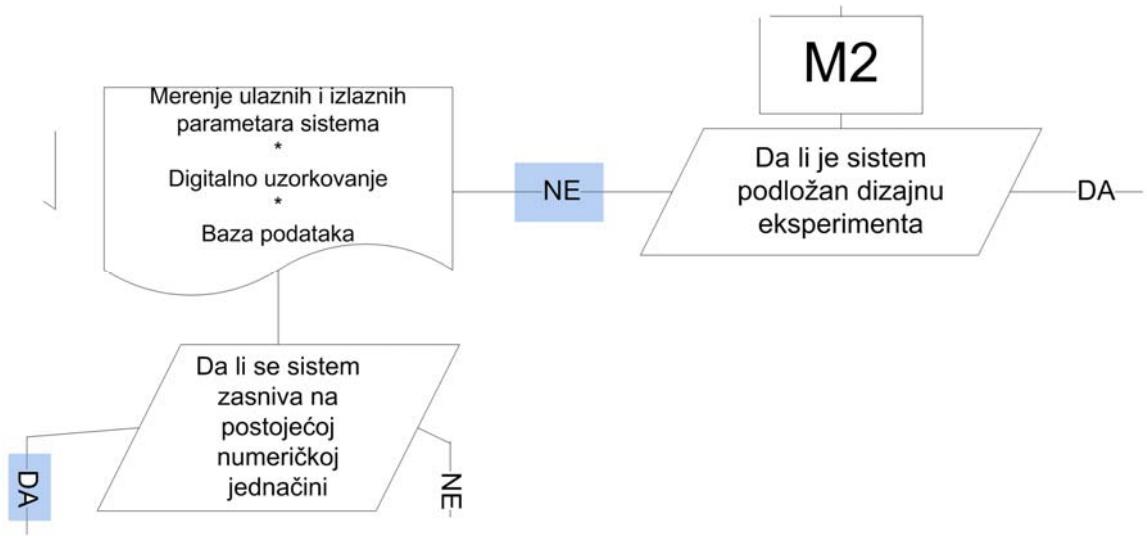


Slika 4.11. Realni sistem nije podložan akviziciji podataka na osnovu dizajna eksperimenta

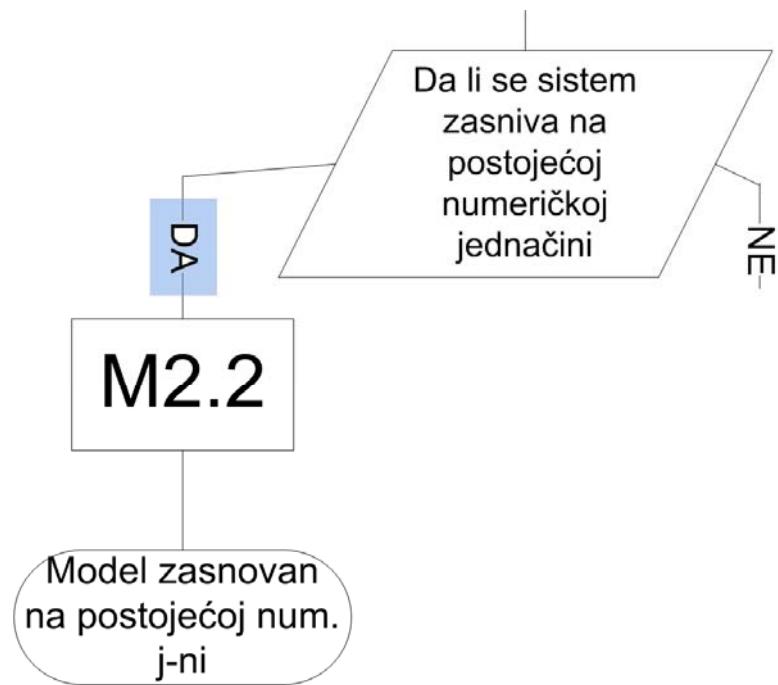
U situaciji predstavljenoj na slici 4.11., nije moguće dizajnirati eksperiment, već se podaci o procesu koji želimo modelovati mogu dobiti isključivo direktnim merenjem na sistemu u toku regularnog procesa rada. Potom se dalji proces modelovanja zasniva na bazi podataka koja je dobijena merenjem ulaznih i izlaznih parametara procesa u toku definisanog perioda vremena.

Samo numeričko modelovanje tako dobijenih podataka o sistemu je, u ovom slučaju, moguće izvršiti na dva načina. Jedan način je zasnovan na odabiru najadekvatnije jednačine modela iz seta postojećih numeričkih jednačina modela, dostupnih u literaturi (u daljem tekstu M2.2. način modelovanja). Drugi način modelovanja se zasniva na primeni linearne ili nelinearne statistike kao alata za dobijanje finalnog modela procesa (u daljem tekstu M2.3. način modelovanja).

Prema tome, nakon odluke definisane na slici 4.11, odgovorom NE na postavljeno pitanje, postavlja se još jedno pitanje (slika 4.12). Ukoliko je odgovor na pitanje: „da li je sistem moguće modelovati nekom od postojećih numeričkih jednačina“ – DA, tada se primenjuje metodologija M2.2. Ukoliko je odgovor – NE, primenjuje se metodologija M2.3.



Slika 4.12. Odluka o primenjivosti postojećih numeričkih jednačina modela



Slika 4.13. Model zasnovan na postojećoj numeričkoj jednačini

U slučaju odgovora na pitanje dato na slici 4.12., - DA, pristupa se daljem modelovanju selekcijom najadekvatnije jednačine numeričkog modela koja će sa dovoljnom tačnošću opisivati razmatrani proces (slika 4.13). Sama suština navedenog načina modelovanja sastoji se u najadekvatnijem načinu za selekciju optimalne numeričke jednačine modela.

Praktični primeri takve metodologije modelovanja su predstavljeni u referencama (Mihajlović et al., 2005; Mihajlović et al., 2007; Mihajlović et al., 2011a). U sva tri slučaja opisano je istraživanje najoptimalnijeg načina uklanjanja arsena iz koncentrata bakra. Razlog takvom istraživanju leži u činjenici da je arsen jedan od najopasnijih polutanata prisutnih u rudi bakra, koji se gotovo u potpunosti transferuje u koncentrat nakon procesa flotacije, usled fizičko hemijskih karakteristika mineraloške forme koji ne dozvoljavaju njegovu eliminaciju samom flotacijom. S druge strane, arsen je jedan od najčešćih pratioca bakra u sulfidnim rudnim ležištima. Najčešće mineraloške vrste koje sadrže arsen, a prisutne su u ležištima bakra su, enargit i luzonit (Cu_3AsS_4); potom realgar (As_2S_2) i arsenoprit ($FeAsS$), koji su prisutni u nešto manjem obimu. Posebno je značajno prisustvo arsena, koji se veoma često nalazi kao pratioc osnovnih mineraloških formi bakra u borskom rudnom ležištu.

Arsen, kao i njegovi oksidi, je veoma isparljiv na nižim temperaturama pirometalurškog tretmana i napušta reaktor kao konstituent emitovanih gasova procesa. Samim time, tokom pirometalurške ekstrakcije bakra iz takvih koncentrata, koji imaju viši sadržaj arsena, arsen se emituje u atmosferu u formi lako isparljivih oksida (Mihajlović et al., 2005). Iz navedenog razloga, teži se snižavanju koncentracije arsena u koncentratu, za pirometalurški tretman, na manje od 0.5% (Vinals et al., 2002).

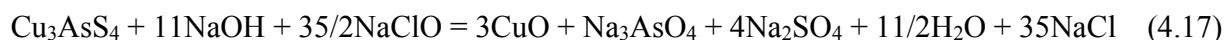
U referenci (Mihajlović et al., 2005) vršeno je istraživanje mehanizma oksidacije arsenovih sulfida u uslovima pirometalurške ekstrakcije bakra, kako bi se sakupilo dovoljno podataka o ponašanju arsenovih sulfida i oksida u procesu, i na osnovu toga predložili potencijalni načini njegovog uklanjanja. Samim time, u referencama (Mihajlović et al., 2007.) i (Mihajlović et al., 2011a), nastavljeno je istraživanje u cilju uklanjanja arsena iz koncentrata bakra primenom predflotacionog tretmana zasnovanog na alkalno-oksidnom luženju enargita u rastvoru hipohlorita.

U svim slučajevima, metod selekcije najoptimalnije jednačine numeričkog modela zasnovao se na primeni metodološkog pristupa koji je u prethodnom tekstu naznačen kao M2.2.

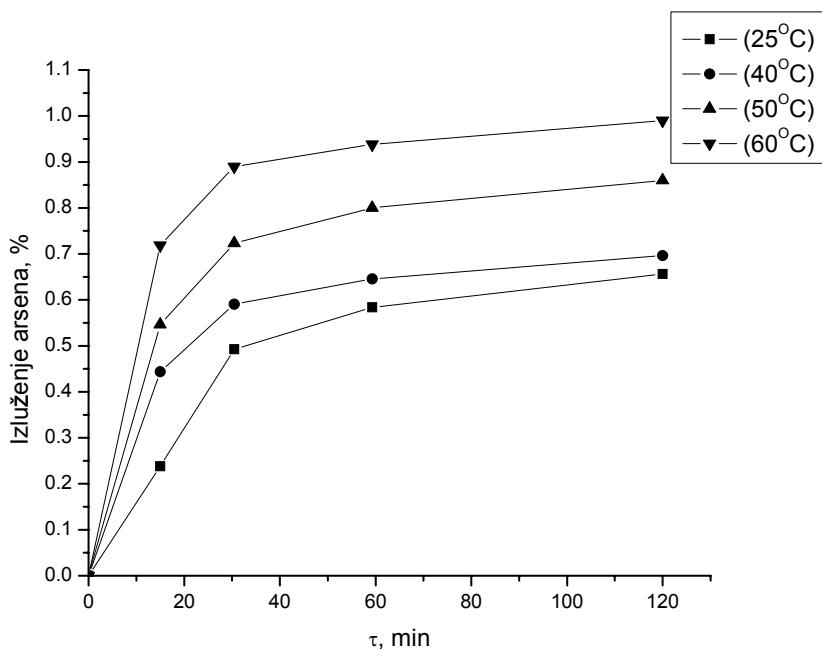
Naime, kako bi se formirao model za određivanje optimalnih uslova za uklanjanje arsena (prisutnog u vidu minerala enargita) iz koncentrata bakra, pre njegovog pirometalurškog

tretmana, za analizu su izdvajani veliki prirodni kristali enargita iz Borskog rudnog ležišta, rudno telo "H". Ove mineraloške forme su u sebi sadržale u proseku 26.25% Cu, 19.48% S ali i čak 10.34% As. Direktan pirometalurški tretman, prženjem, takve sirovine dovodi do formiranja gasne mešavine koja sadrži SO_2 i As_4O_6 (Mihajlović et al., 2007). Na temperaturi od 750°C , 81% prisutnog arsena će napustiti reaktor i kao gasovita komponenta biti emitovan u okruženje. Iz navedenog razloga, razmatran je način da se arsen ukloni iz polazne sirovine pre procesa pirometalurškog tretmana.

Kao najoptimalniji način, odabran je proces luženja enargita rastvorom natrijum hipohlorita (NaClO) pod bazno –oksidnim uslovima u kojima se enargin transformiše u kristalni CuO i rastvor koji sadrži AsO_4^{3-} (Vinals et al., 2002; Cureli et al., 2005). Eksperimenti luženja su se odvijali u termostatičkom reaktoru od 1 dm^3 uz mehaničko mešanje. Temperature luženja su bile u opsegu $25\text{-}60^{\circ}\text{C}$ a vremenski intervali do 120 min. Proces luženja se odvijao prema sledećem hemizmu:



Na osnovu stehiometrije reakcije (4.17), udeo odreagovalog enargita određivan je kao funkcije izdvojenog arsena (X_{As}). Naime, čvrst ostatak nakon luženja je analiziran na koncentraciju As, potom je iz razlike u odnosu na polaznu koncentraciju As u uzorku, definisan stepen izluženja. Na osnovu eksperimentalnih merenja dobijeni su rezultati izluženja arsena iz polaznih uzoraka predstavljeni na slici 4.14.



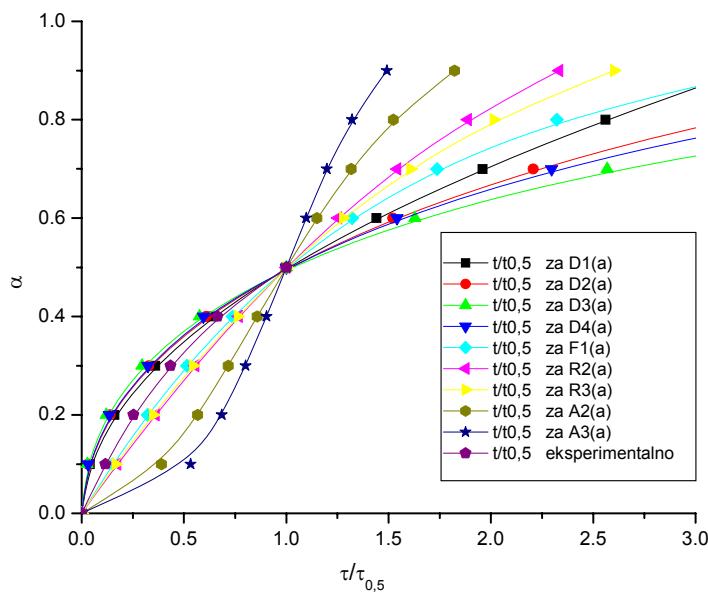
Slika 4.14. Uticaj temperature luženja na uklanjanje arsena u funkciji vremena

Kako bi se dobila najoptimalnija numerička jednačina modela koja bi najbolje opisala proces predstavljen na slici 4.14. upotrebljena je metoda definisana od strane Sharp-a sa saradnicima (1966). Naime, linearizacija eksperimentalnih rezultata, predstavljenih na slici 4.14., testira se upotrebom devet kinetičkih jednačina, predloženih od Sharp-a sa saradnicima (1966). Potencijalne kinetičke jednačine su predstavljene u Tabeli 4.8.

Selekcija najadekvatnije od kinetičkih jednačina datih u tabeli 4.8., može se raditi na više načina. Jedan od načina je da se za izoterme date na slici 4.14., izračuna redukovano poluvreme rakačije ($t/t_{0.5}$). Potom se podaci redukovanih poluvremena reakcije, za izoterme sa slike 4.14., upoređuju sa krivama poluvremena reakcije jednačina iz Tabele 4.8 (Štrbac et al., 2006). Sam dijagram za upoređenje eksperimentalno dobijenog redukovanih poluvremena reakcije sa redukovanim poluvremenom reakcije svih devet kinetičkih jednačina iz tabele 4.8, predstavljen je na slici 4.15, gde su α – stepen odvijanja reakcije a $\tau_{0.5}$ poluvreme reakcije.

Tabela 4.8. Jednačine kinetičkih modela predloženih od Sharp-a (1966)

Funkcija	Jednačina	Proces koji određuje brzinu reakcije
D ₁	$\alpha^2 = k \cdot t$	Jednodimenzionalna difuzija, Dvodimenzionalna difuzija,
D ₂	$(1-\alpha)\ln(1-\alpha) + \alpha = k \cdot t$	Cilindrična simetrija
D ₃	$[1 - (1-\alpha)^{1/3}]^2 = k \cdot t$	Trodimenzionalna difuzija, Sverična simetrija, Janderova jednačina
D ₄	$(1 - 2/3\alpha) - (1-\alpha)^{2/3} = k \cdot t$	Trodimenzionalna difuzija, Sferična simetrija, Ginstling – Braunštajnova jednačina
F ₁	$-\ln(1-\alpha) = k \cdot t$	Slučajno obrazovanje centara nove faze, jedan centar na jednu česticu
A ₂	$[-\ln(1-\alpha)]^{1/2} = k \cdot t$	Slučajno obrazovanje centara nove faze, jednačina Avrami (I)
A ₃	$[-\ln(1-\alpha)]^{1/3} = k \cdot t$	Slučajno obrazovanje centara nove faze jednačina Avrami (II)
R ₂	$1 - (1-\alpha)^{1/2} = k \cdot t$	Reakcija na granici deobe faza, cilindrična simetrija
R ₃	$1 - (1-\alpha)^{1/3} = k \cdot t$	Reakcija na granici deobe faza, sferična simetrija



Slika 4.15. Upoređenje eksperimentalne krive sa devet različitih kinetičkih jednačina predloženih od Sharp-a

Na osnovu dobijenih podataka sa slike 4.15, bira se najoptimalnija od devet jednačina. Naime, najoptimalnija je ona kinetička funkcija koja se nalazi najbliže eksperimentalnoj krivoj (Mihajlović et al., 2005; Minić et al., 2005). Međutim, treba imati u vidu da je ovakav način selekcije jednačine, pomoću slike 4.15, razvijen 1966. Godine, kada nije bilo moguće vršiti precizne kalkulacije primenom savremenih informaciono komunikacionih tehnologija. U savremenoj praksi primene metode Sharp-a (Sharp et al., 1966), selekcija najoptimalnije od devet predloženih jednačina se vrši primenom adekvatne računarske aplikacije. Naime, u radu (Mihajlović et al., 2007), u te svrhe je upotrebljen MLAB softver (MLAB, Civilized Software).

Na taj način, linearizacija eksperimentalnih podataka (sa slike 4.14) je urađena upotrebom svih devet kinetičkih jednačina u istovreme. Potom se selekcija najbolje linearizacije za svaku eksperimentalnu tačku i selekcija najoptimalnije od devet jednačina, vrši prema kriterijumu standardne devijacije linearnih podataka u poređenju sa linearnim fitovanje eksperimentalnih podataka dobijenih iteracijom u programu MLAB. Standardna devijacija svih devet jednačina je izračunata primenom formule:

$$SD = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_M - y_F)_i^2} \quad (4.18)$$

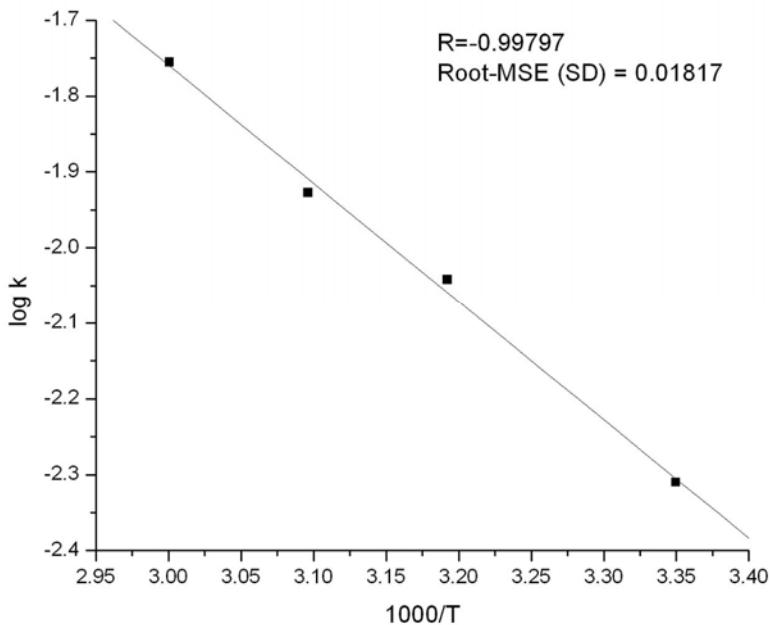
Gde su: SD – standardna devijacija; n – broj korišćenih eksperimentalnih tačaka; y_M – vrednosti tačaka na pravoj liniji dobijeni upotrebom MLAB softvera iteracije; y_F – vrednosti linearnih eksperimentalnih podataka dobijenih upotrebom svake od kinetičkih jednačina predloženih od Sharp-a (Tabela 4.8).

Na taj način, kao najoptimalnija kinetička jednačina za linearizaciju eksperimentalnih podataka luženja enargita (Slika 4.14), određena je jednačina D4 (Mihajlovic et al., 2007):

$$(1-2/3\alpha) - (1-\alpha)^{2/3} = k \cdot t \quad (4.19)$$

gde su: α – stepen izluženja, t – vreme, k – konstanta brzine. Odabrana jednačina D4 predstavlja proces trodimenzionalne difuzije u sferičnoj simetriji, i naziva se jednačina Ginstling–Braunstein-a (Tabela 4.8).

Na osnovu nagiba lenarizovanih izotermi, određuju se konstante brzine na različitim temperaturama procesa (jednačina 4.19) i na osnovu njih se konstruiše Arrhenius-ov dijagram (Slika 4.16).



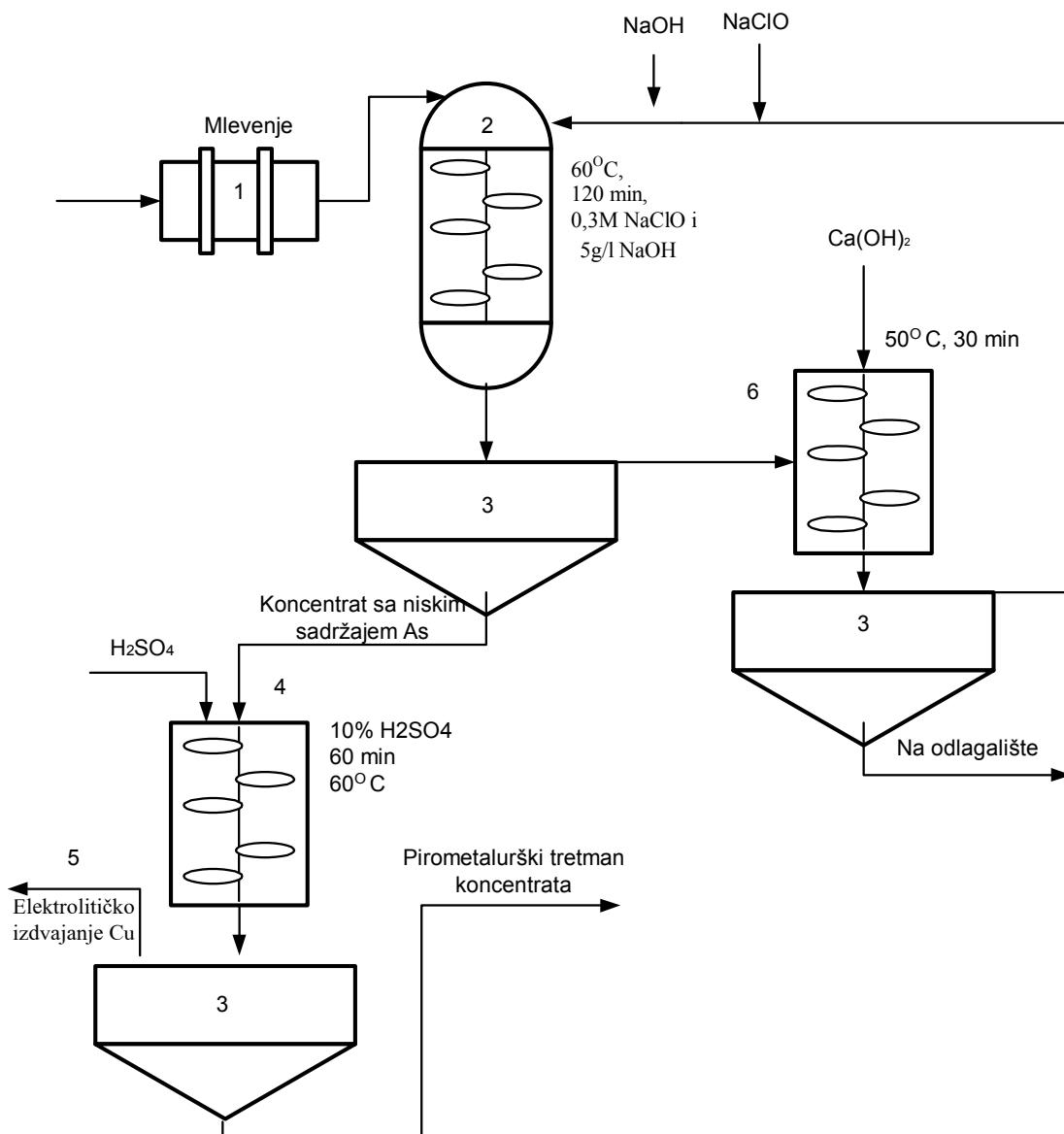
Slika 4.16. Arrhenius-ov dijagram procesa luženja enargita

Na osnovu Arrhenius-ovog dijagrama, izračunata je energija aktivacije razmatranog procesa, pod izoternskim uslovima. Konačna kinetička jednačina modela ovog procesa je na taj način:

$$(1-2/3\alpha) - (1-\alpha)^{2/3} = k \cdot t = 837.87 \cdot \exp(-3608/T) \cdot t \quad (4.19)$$

Gde je T –apsolutna temperatura procesa.

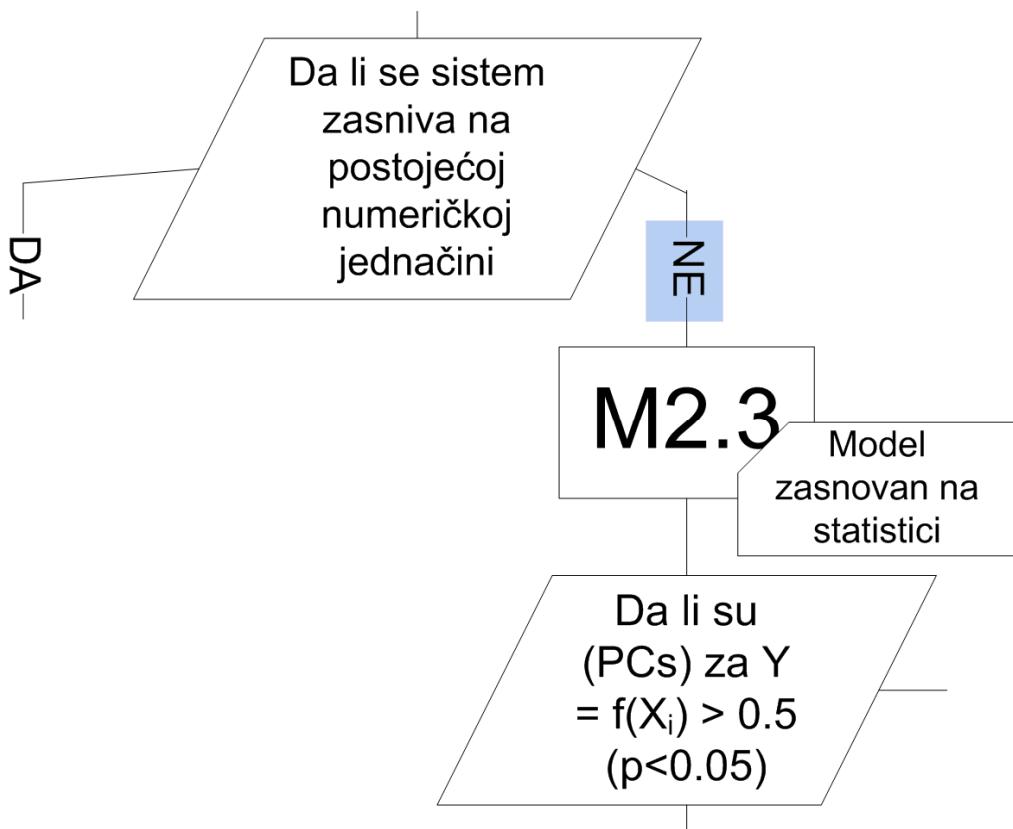
Na osnovu navedene jednačine modela moguće je proračunavati stepen izluženja arsena iz enargita, pri različitim temperaturama i u funkciji trajanja procesa. Prema opisanim podacima i izvršenim proračunima, kao ishod procesa modelovanja predložena je tehnološka šema porcesa luženja arsena iz koncentrata bakra, predstavljen na slici 4.17.



Slika 4.17. Tehnološka šema procesa uklanjanja arsena iz enargita (Mihajlović et al., 2007)

Na taj način, primenom metodologije koja je u prethodnom tekstu opisana kao M2.2., izvršena je selekcija najoptimalnije od već predloženih kinetičkih jednačina i na osnovu nje definisana konačna numerička jednačina modela razmatranog procesa. Na osnovu slike 4.16, očigledna je velika tačnost predviđanja, sa koeficijentom korelacije od 0.997.

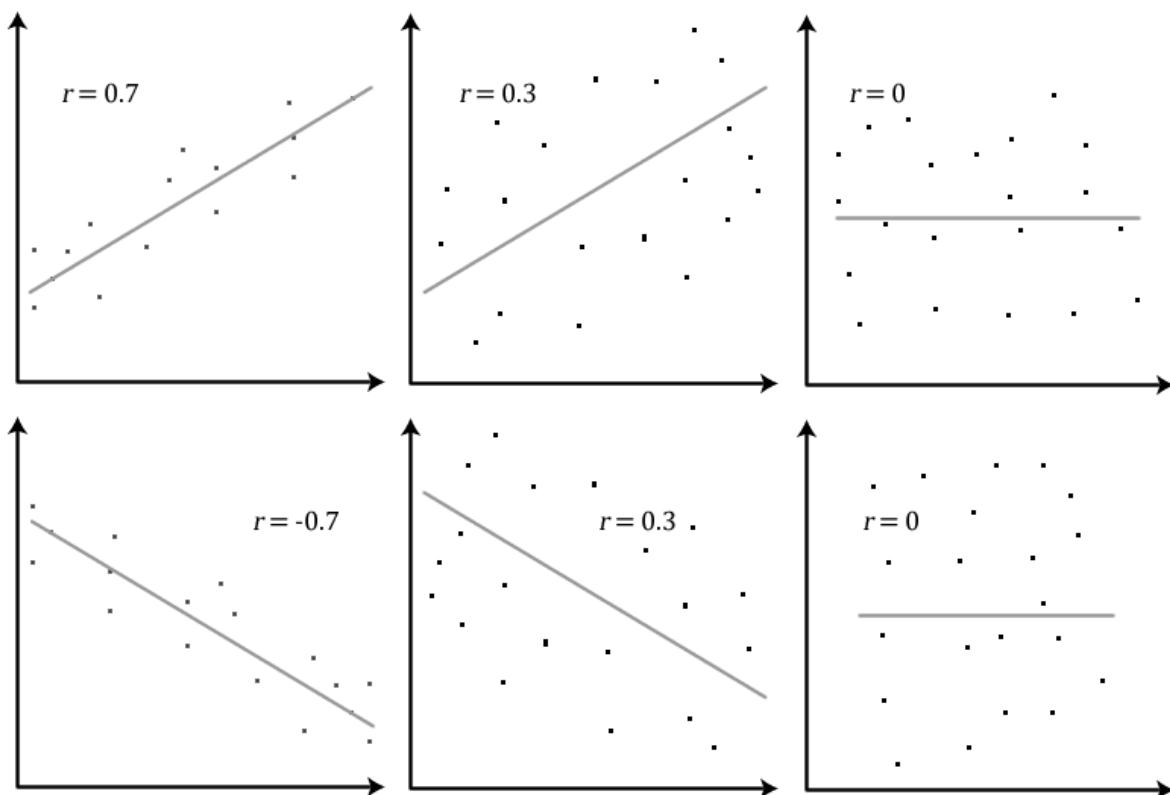
Međutim, u pojedinim slučajevima, postojeće kinetičke jednačine ne daju dovoljno tačan model posmatranog procesa (Slika 4.18). U takvim slučajevima se primenjuje modelovanje zasnovano na linearnoj ili nelinearnoj statistici, definisano kao M2.3 u prethodnom tekstu.



Slika 4.18. Modelovanje u slučaju nemogućnosti priemene već postojeće numeričke jednačine modela

Kako je već opisano u prethodnom tekstu, veoma često se primenjuju linearne i nelinearne metode statističkog modelovanja realnih sistema. Ipak, postoje određeni jaki indikatori, koji mogu biti od koristi kada se odlučuje koji pristup (linearan ili nelinearan) je najadekvatniji za modelovanje podataka dobijenih merenjem na konkretnom procesu. Prvi korak u donošenju odluka o primenjivosti linearnih ili nelinearnih statističkih alata, za modelovanje, jeste analiza korelacije varijabli sistema (Slika 4.18). Da bi se definisala koreaciona zavisnost u formi: *izlaz procesa (Y) = fulazi procesa (X_i; i = 1 ÷ n)*, upotrebljava se bivarijantna koreaciona analiza. Kao rezultati bivarijantne koreacione analize dobijaju se vrednosti Pearson-ovih koreacionih (PC) koeficijenata uz odgovarajuću statističku značajnost svakog od njih.

Inače Pearson-ov produkt-moment korelacioni koeficijent (ukratko poznat kao Pearson-ov koeficijent) je mera snage linearne asocijacije između dve varijable i označava se sa r . U suštini, Pearsonova produkt-moment korelacija pokušava da ucrti liniju najboljeg fitovanja unutar tačaka sa podacima o dinamičkim promenama dve varijable. Pearson-ov korelacioni koeficijent (r) indicira koliko su sve te tačke udaljene od linije najboljeg fitovanja (koliko dobro ove tačke mogu biti fitovani datom linijom linearnog modela). Primer fitovanja linearnim modelom za različite vrednosti korelacionog koeficijenta r je dat na slici 4.19 (Laerd Statistics).



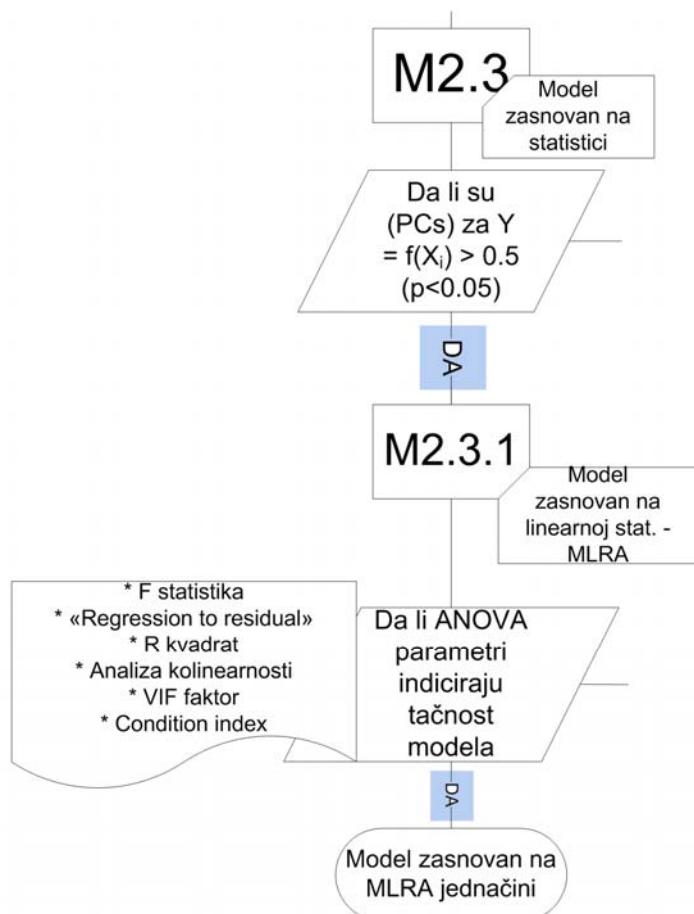
Slika 4.19. Primeri pozitivne i neativne korelacijske podataka

Pearson-ovi korelacioni koeficijenti mogu imati vrednost od +1 do -1. Vrednost jednaka 0 indicira da nema povezanosti između ponašanja dve varijabile. Vrednost iznad 0 pokazuje pozitivnu asocijaciju; odnosno, ukoliko se vrednost jedne varijable povećava, povećavaće se i vrednost druge. Ovakav vid zavisnosti je prikazan na gornjoj polovini slike 4.19. Vrednosti Pearson-ovih koeficijenata manje od 0 pokazuju negativnu asocijaciju; odnosno, kako vrednosti jedne varijabile rastu, opadaju vrednosti druge. Ovo je pokazano u donjem delu slike 4.19.

Što je jača asocijacija između dve varijabile, vrednost Pearson-ovog korelacionog koeficijenta je bliža vrednosti +1 ili -1, zavisno od toga da li je odnos pozitivan ili negativan, respektivno.

Dostizanje vrednosti od +1 ili -1, znači da su sve razmane tačke dve varijable zapravo smeštene na liniji najboljeg fitovanja, odnosno nema tačaka koje pokazuju bilo kakvu varijaciju u odnosu na ovu liniju. Vrednosti r između +1 i -1 (npr. $r = 0.7$ ili -0.6) pokazuju da postoji određena, manja ili veća, varijacija oko linije najboljeg fitovanja.

Da bi se primenili alati linearne statistike u slučaju zavisnosti $izlaz procesa (Y) = f ulazi procesa (X_i; i = 1 \dots n)$ (npr. višestruka linearna regresiona analiza - multiple linear regression analysis (MLRA)), uz prihvatljivi nivo fitovanja, literaturom je definisano da je najčešće neophodno da su vrednosti PC iznad 0.5 (ili ispod -0.5), uz statističku značajnost ($p \leq 0.05$) za većinu odnosa između Y i X_i (Moroney, 1998; Živković et al., 2010). Međutim, čak i u takvim slučajevima, dobijeni MLRA model mora se dalje testirati u cilju ocenjivanja tačnosti. Najčešće primenjivan test primenjivosti MLRA metoda modelovanja je ANOVA – Analiza varijanse (Slika 4.20)



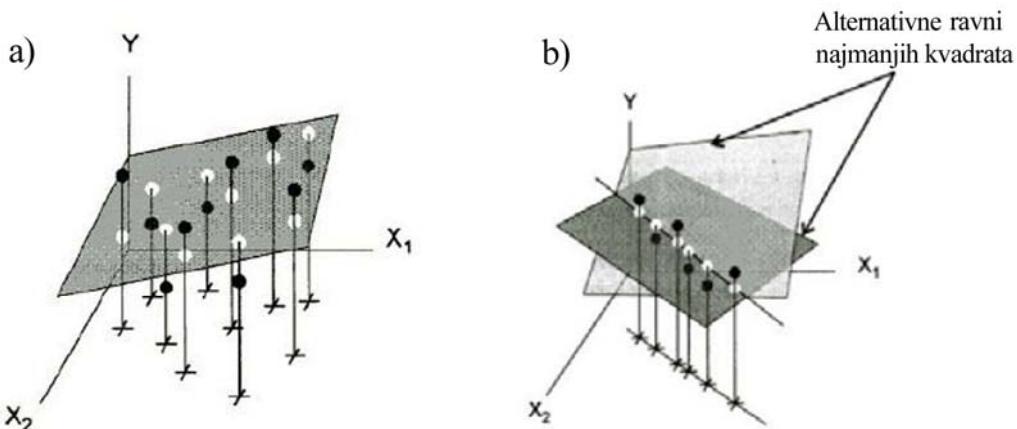
Slika 4.20. Testiranje MLRA modela ANOVA testom

ANOVA statistička analiza zapravo predstavlja (ANOVA = ANalysis Of VAriances) skup više statističkih testova koji se koriste za analizu razlika između srednjih vrednosti dveju ili više varijabli. Ova analiza je razvijena od strane R.A. Fisher-a (1925). U ANOVA analizi primećena varijacija kod određenih varijabli se razlaže u komponente koje mogu biti podložne različitim uzrocima varijacije. Savremeni koncept ANOVA analize se sastoji od većeg broja testova: test F statistike („F statistics“), odnosa regresija : ostatak („Regression to Residual“), koeficijenta determinisanosti („R-squared“), analize kolinearnosti („Collinearity analysis“), faktora porasta varijanse („VIF factor“) i kondicionog indeksa („Condition index“) (Đorđević et al., 2010; Živković et al., 2010).

F-statistika, upravo nosi oznaku po R.A. Fisher-u, jer je takođe poznata i kao Fisher-ov test. Značajna vrednost vrednosti F statistike je indikator da je upotreba modela bolja od slučajne procene srednje vrednosti varijable. Takođe, ukoliko je statistička značajnost F statistike manja od 0.05, ovo znači da varijacije opisane modelom nisu rezultat slučajnosti. Regresija („Regression“) opisuje informaciju o varijacijama koje je obuhvatilo model, dok Ostatak („Residual“) opisuje informaciju o varijacijama koje model nije obuhvatilo. Odnos „Regresija ka Ostaku“ predstavlja nivo na kojem su premene vrednosti zavisne varijable (Y) obijašnjeno modelom a nisu proizvod slučajnosti. Ovaj odnos je takođe jednak vrednosti koeficijenta determinisanosti (R^2) između izmerene vrednosti Y i vrednosti Y proračunate modelom. Na kraju, u okviru ANOVA testa se radi i analiza kolinearnosti dobijenog MLRA modela. Kolinearnost podataka je veoma značajna, jer ponekad nedovoljno iskusni istraživači mogu pretpostaviti da je u pitanju dobar MLRA model, samo iz razloga visoke vrednosti koeficijenta determinisanosti između izmerene i modelom proračunate vrednosti Y, a da se zapravo radi o multikolinearnosti. Naime, u situaciji prikazanoj na slici 4.21. a), vrednost koeficijenta determinisanosti izvesno nije visoka, ali je sve tačke funkcionalne zavisnosti $Y = f(X_1, X_2)$ moguće obuhvatiti jednom ravni. U situaciji na slici 4.21. b), gotovo sve tačke leže na jednoj pravoj liniji, što rezultuje visokom vrednošću koeficijenta determinisanosti, ali je takođe zavisnost $Y = f(X_1, X_2)$ moguće opisati većim brojem ravnih, što zapravo i predstavlja multikolinearnost.

Kako bi se izbegla pojava multikolinearnosti u MLRA modelu, radi se tzv test analize kolinearnosti („Collinearity analysis“). U te svrhe se mere vrednosti parcijalne, delimične i korelacije nultog reda („partial“, „part“ i „zero-order“), kao i faktor tolerancije („tolerance“). Na taj način, ukoliko za većinu prediktora (X_i), vrednosti parcijalne i delimične korelacije oštro opadaju u odnosu na korelaciju nultog reda, to znači da se značajan iznos varijansi vrednosti Y, koja je opisana sa setom vrednosti X_i , može opisati i nekim drugim setom vrednosti (drugom ravni u slučaju dvodimenzionalnog sistema). Vrednost faktora tolerancije predstavlja procenat varijanse datog prediktora koji se ne može opisati setom drugih prediktora. Na taj način,

relativno niska vrednost tolerancije u slučaju nekih prediktora pokazuje da visok procenat varijanse date zavisne veličine (Y) može biti opisana i preko drugih prediktora, odnosno da model ima izraženu multikolinearnost. Sledeći test u okviru ANOVA statistike je VIF – faktor porasta varijanse (VIF – „variance inflation factor“). Ova vrednost se zapravo izračunava kao recipročna vrednost tolerancije $VIF = 1/(1-R^2)$. Samim time, vrednosti VIF iznad 2 se obično smatraju problematičnim u analizi MLRA modela. Sledeći značajan test u okviru ANOVA analize je kondicioni indeks („condition index“). Ovaj index pokazuje numeričku nestabilnost modela. Ukoliko je vrednost iznad 15, to ukazuje na moguć problem sa kolinearnošću, za vrednost iznad 30 to je ozbiljan problem.



Slika 4.21. Prikaz problema multikolinearnosti kod MLRA (York University, 2013)

Na taj način, na osnovu slike 4.20, ukoliko su vrednosti PC-a dovoljno velike, uz statističku značajnost ispod 0.05 i ukoliko su ANOVA indikatori i analiza kolinearnosti na zadovoljavajućem nivou, tada se dobijeni MLRA model može smatrati adekvatnim za tačno predviđanje izlaznih veličina procesa. Ovakav pristup modelovanju će biti indeksiran kao M2.3.1. u daljem tekstu.

Praktični primeri M2.3.1. načina modelovanja, koja su rezultovala modelima dovoljne tačnosti, su predstavljeni u referencama (Živković et al., 2009; Živković et al., 2010 and Đurić et al., 2010c).

Kako bi se opisale gornje tvrdnje u selekciji MLRA modela, detaljno će biti opisani rezultati publikovani u radu (Živković et al., 2010). U ovom radu predstavljeni su rezultati statističkog modelovanja procesa razlaganja industrijskog rastvora natrijum aluminata, kao deo Bayer-ovog procesa proizvodnje glinice (Habashi, 1997). Cilj studije bio je da se definiše korelaciona

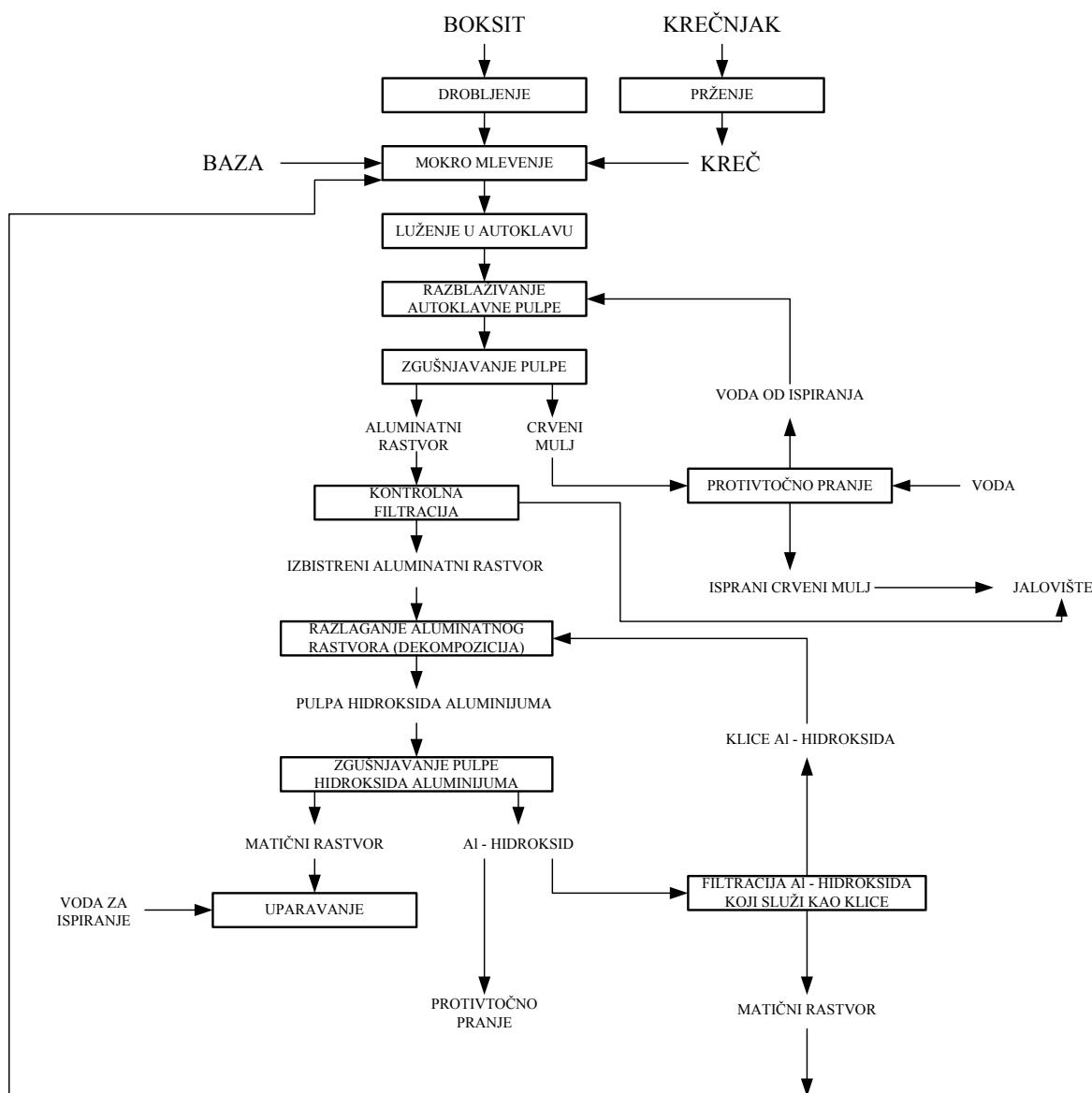
zavisnost stepena razlaganja aluminatnog rastvora u funkciji najznačajnijih tehnoloških parametara procesa. Kao alat matematičkog modelovanja upotrebljena je MLRA tehnika.

Godine 1888, Karl Josef Bayer razvio je i patentirao process koji je postao osnova industrijske proizvodnje glinice u svetu (Đurić et al., 2010a). Bayer-ov proces ekstrakcije glinice je osnovna komercijalna procedura i više od 90% svetske proizvodnje se dobija na ovaj način. Bez obzira na činjenicu što se ovaj proces koristi za proizvodnju glinice veoma dugo, još uvek postoje pokušaji daljeg unapređenja same tehnologije (Gontijo et al., 2009).

Bayer-ov proces se odnosi na gotovo sve tehnike komercijalne prerade boksita u cilju dobijanja aluminijuma. Bayer-ov postupak je zatvoreni ciklus u odnosu na cirkulaciju rastvora natrijum aluminata. Sa sl. 4.22., vidi se da je polazna sirovina boksit, sa dodatkom (ili bez dodatka) kreča, prethodno pripremljenim drobljenjem i mlevenjem u cilju usitnjavanja. Mlevenje je obično mokro u suspenziji sa kaustificiranim povratnim rastvorom (Štrbac et al., 2002).

Boksit je kompleksan heterogen rudni materijal koji se koristi u Bayer-ovom procesu. Aluminijum se obično nalazi u boksu u formi hidroksidnih minerala, kao što su gibsit (*hydrargilit*) ($\text{Al}(\text{OH})_3$), bemit (AlO(OH)) ili dijaspor (HAIO_2). Osim minerala aluminijuma, boksići sadrže i različite komponente silicijum dioksida (SiO_2), aluminosilikate, železo oksid (Fe_2O_3), titan oksid (TiO_2) i druge nečistoće; kao što su karbonati i sulfidi, u tragovima (Habashi, 1997; Habashi, 2009; Zhanh et al., 2003). Ipak, najznačajniji konstituenti rude boksita su Al_2O_3 , SiO_2 i Fe_2O_3 , jer njihov sadržaj direktno utiče na dalje ponašanje u Bayer-ovom procesu.

Dobijena pulpa samlevenog boksita i povratnog rastvora odlazi u autoklave gde se boksit, zavisno od mineraloškog sastava luži. Luženjem se dobija pulpa koju čini aluminatni rastvor i ostatak od luženja, tzv. crveni mulj. Pulpa se nakon luženja prvo hlađi u ekspanderima do temperature koja odgovara naponu vodene pare ekvivalentne atmosferskom pritisku, a potom se razblažuje vodom, od ispiranja crvenog mulja. Razblažena pulpa upućuje se na odvajanje crvenog mulja od aluminatnog rastvora dekantacijom u zgušnjivačima. Odvojeni crveni mulja se zatim višestruko ispira vodom i potom, ispran, deponuje na jalovište. Aluminatni rastvor dobijen dekantacijom kao preliv zgušnjivača, podvrgava se filtraciji u cilju izdvajanja mehanički ponetihi čestica crvenog mulja. Nakon toga hlađi se u izmenjivačima toplote (pri čemu se istovremeno predgreva povratni rastvor pre uparavanja), a zatim se šalje na razlaganje u cilju dobijanja čvrstog aluminijum – hidroksida.



Slika 4.22. Tehnološka šema proizvodnje glinice po Bayer-ovom postupku (Štrbac et al., 2002)

Pre razlaganja aluminatni rastvor se meša sa povratnim Al(OH)_3 , čije čestice služe kao klice za kristalizaciju i na toj osnovi ubrzavaju process. Razlaganje se izvodi laganim mešanjem i ravnomernim hlađenjem rastvora. Pulpa izdvojenog aluminijum – hidroksida i rastvora posle razlaganja odlazi na dekantaciju u zgušnjivačima radi odvajanja aluminijum – hidroksida. Tako zgušnuta pulpa sa dva zgušnjivača u količini 25 – 50% filtrira se na doboš vakuum filterima, a izdvojeni hidroksid se, posle pranja, upućuje na kalcinaciju u cilju dobijanja bezvodnog oksida

aluminijuma – glinice. Preostali deo hidratne pulpe u količini 50 – 75% filtrira se na disk vakuum – filterima, a izdvojeni hidroksid se, bez pranja, vraća u proces razlaganja novih količina aluminatnog rastvora.

Rastvor posle razlaganja, tzv. matični ili povratni rastvor, sa 48 – 50% nerazloženog natrijum – aluminata i količinom NaOH ekvivalentnom razloženom aluminatu, odlazi zajedno sa vodom od ispiranja aluminijum – hidroksida u proces uparavanja radi povećanja njegove koncentracije do vrednosti koja je neophodna za process luženja boksita. Upareni rastvor posle korekcije sadržaja NaOH, tj. nadoknade njenih gubitaka, odlazi u process luženja, odnosno mokrog mlevenja boksita, čime je Bayer-ov ciklus zatvoren.

Pri uparavanju povratnog rastvora često dolazi do izdvajanja kristalne sode, koja nastaje reagovanjem NaOH sa karbonatima prisutnim u boksu u procesu njegovog luženja. Izdvojena soda posle odvajanja od aluminatnog rastvora, najčešće se podvrgava kaustifikaciji sa $\text{Ca}(\text{OH})_2$ radi regeneracije natrijum – hidroksida. Kaustifikacijom dobijeni rastvor NaOH vraća se u Bayer-ov zatvoreni ciklus, ili zajedno sa matičnim rastvorom u process uparavanja, ili u proces ispiranja crvenog mulja.

Kako je već rečeno, predmet analize i modelovanja predstavljen u radu (Živković et al., 2010) bio je segment Bayer-ovog procesa koji se odnosi na razlaganje aluminatnog rastvora. Iz tog razloga će u daljem tekstu biti dodatno navedeno par najznačajnijih tehnoloških detalja ovog segmenta Bayer-ovog procesa. Kristalizacija aluminijum hidroksida ($\text{Al}(\text{OH})_3$) iz kaustičnog aluminatnog rastvora je i ujedno tehnološki segment koji određuje ukupno trajanje celokupnog Bayer-ovog procesa, obzirom da je najsporiji segment. Kako bi se kontrolisala distribucija veličine dobijenih čestica aluminijum hidroksida, neophodno je kontrolisati dimenzije i karakteristike povratne frakcije koja se koristi kao centri kristalizacije. Obzirom na kompleksnost samog procesa, mehanizam kristalizacije aluminijum hidroksida nije još uvek potpuno poznat i još uvek je predmet izučavanja brojnih istraživača (Li et al., 2005). Tokom kristalizacije $\text{Al}(\text{OH})_3$, rast i okrupnjavanje kristala se dešava istovremeno. U istraživanjima autora (Li et al., 2005) ustanovljeno je da mineraloška forma dobijenih kristala, tokom razlaganja aluminatnog rastvora, kao i njihova distribucija dimenzija zavisi od koncentracije polaznog rastvora na temperaturama u opsegu $65 - 70^\circ\text{C}$. To je takođe potvrđeno i u istraživanjima Dash et al., (2007). Na osnovu literaturnog pregleda, kinetika kristalizacije gibsita iz kaustičnog natrijum aluminatnog rastvora, kao i veličina i oblik dobijene očvrsle forme, zavisi od sledećih parametara procesa: temperatura, kaustični odnos rastvora, količina i dimenzije nukleusa kristalizacije, brzina mešanja i prisustvo aktivacionih jona dodatih rastvoru (Seyssieck et al., 1996; Blagojević et al., 1999; Li et al., 2000; Dash et al., 2007).

Osim kristalizacije gibsita, u skorašnjoj literaturi su predstavljeni i rezultati kristalizacije bemita (AlOOH) iz aluminatnog rastvora (Chen et al., 2006; Dash et al., 2007; Dash et al., 2009). Istraživanja u ovim referencama su imala za cilj pronalaženje održive alternative trenutne tehnologije proizvodnje glinice – zasnovane na Bayer-ovom procesu. U tim istraživanjima, taloženje bemita je ostvareno u visoko zasićenim rastvorima na temperaturama višim od 90°C (Panais i Paspaliaris, 2003). Ipak, Bayer-ov proces je još uvek u velikoj prednosti u poređenju sa takvim alternativama (Habashi, 2009).

S druge strane, većina rezultata publikovanih u referencama, koji se odnose na kristalizaciju gibsita iz rastvora natrijum aluminata su dobijeni u okviru laboratorijskih istraživanja, uz upotrebu sintetičkih rastvora (Seyssieck et al., 1996; Li et al., 2000; Watling et al., 2000); na taj način su stvarni uslovi koji vladaju u Bayer-ovom procesu simulirani u laboratorijskim uslovima (Freij i Parkinson, 2005). Stvarni industrijski uslovi kristalizacije gibsita su naravno znatno kompleksniji u poređenju sa laboratorijskim eksperimentima. Istovremeno, proces kristalizacije gibsita je znatno sporiji u poređenju sa ostalim fazama Bayer-ove tehnologije proizvodnje glinice, što je još jedan od razloga zbog kojeg je analiza ovog procesa i u realnim industrijskim uslovima neophodna. Samim time, osnovni motiv za istraživanja predstavljena u radu (Živković et al., 2010) bio je da se izvedu zaključci o mogućnosti predviđanja rezultata kristalizacije gibsita iz kaustičnog rastvora natrijum aluminata u industrijskim uslovima.

U definisanju karakterističnih uticajnih faktora procesa, uzeta su u obzir sledeća razmatranja: Sadržaj Na_2O u polaznim industrijskim rastvorima je u opsegu 150 g/dm^3 and 160 g/dm^3 uz kaustični odnos (molarni odnos $\text{Na}_2\text{O}/\text{Al}_2\text{O}_3$) u opsegu 1.45 do 1.6. Produkt taloženja iz razblaženog rastvora je Bajerit $\text{Al}(\text{OH})_3$ dok je produkt razlaganja zasićenog rastvora Gibrat $\text{Al}(\text{OH})_3$ (Li et al., 2005). Polazna temperatura je u opsegu 60 do 70°C , dok su temperature na kraju procesa razlaganja između 50 i 55°C , koje su u literaturi i predstavljene kao optimalne temperature procesa (Habashi, 2009; Machold et al., 2009). Količina dodatih nukleusa kristalizacije (CS), na početku procesa, je određena kristalizacionim odnosom (CR) koji predstavlja odnos: $\text{CR} = \text{Al}_2\text{O}_3(\text{CS})/\text{Al}_2\text{O}_3(\text{AS})$ – gde je AS koncentracija Al_2O_3 u aluminatnom rastvoru. Porast CR pozitivno utiče na brzinu procesa, kao i porast prosečnog prečnika CS-a uz konstantni CR (Seyssiecq et al., 1998; Blagojević et al., 1999; Freij i Parkinson, 2005; Chen et al., 2006). Pod industrijskim uslovima, CR je u opsegu 2-2.5, uz prosečni prečnik nukleusa od 100 do $120 \mu\text{m}$. Vreme potrebno da se istaloži 80% prisutnog $\text{Al}(\text{OH})_3$ je 70h u laboratorijskim uslovima (Seyssiecq, et al., 1998; Chen et al., 2006; Cao et al., 2009). Pod industrijskim uslovima, nivo dekompozicije je čak i niži, u opsegu je 45 i 55 %, tokom 70 do 80 h. Takođe, ukoliko se proizvodi gruba gлина (Sandy tipa), granulacija finalnog proizvoda treba da je iznad $100 \mu\text{m}$ (Habashi, 2009) uz što manji sadržaj Na_2O ($\leq 0.4\%$).

Industrijska praksa proizvodnje glinice sugerise da ulazni parametri procesa trebaju biti kontrolisani na dnevnom nivou jer svaki od njih utice na kinetiku razlaganja natrijum aluminatnog rastvora. Njihov sinergetski efekat rezultuje izlazom procesa na osnovu kojeg se definiše efikasnost i efektivnost procesa.

Za modelovanje procesa razlaganja aluminatnog rastvora, korišćeni su podaci iz realne proizvodne prakse fabrike Birač, Zvornik (Bosna i Hercegovina). Sami podaci su sakupljeni tokom perioda 2008-2009, merenjem karakterističnih ulaznih i izlaznih parametara procesa, pod stabilnim hodom proizvodnog procesa. Na taj način sakupljeno je 500 linija podataka, koji su se sastojali od sledećih faktora:

- a) Ulazni parametri procesa:
 - Sadržaj Na_2O (kaustično) u rastvoru (g/dm^3) = X_1 ;
 - Kaustični odnos (α_k) rastvora – odnosno molski odnos $\text{Na}_2\text{O}/\text{Al}_2\text{O}_3$ u povratnom alkalnom rastvoru = X_2 ;
 - Kristalizacioni odnos – odnos između sadržaja $\text{Al}(\text{OH})_3$ uvedenog u rastvor kao nukleusi kristalizacije (u formi pulpe) i količine $\text{Al}(\text{OH})_3$ koja se nalazi u kaustičnom rastvoru = X_3 ;
 - Polazna temperatura rastvora ($^{\circ}\text{C}$) = X_4 ;
 - Finalna temperatura rastvora ($^{\circ}\text{C}$) = X_5 ;
 - Prosečni prečnik centara kristalizacije (μm) = X_6 ;
 - Trajanje procesa dekompozicije rastvora (h) = X_7 ;
- b) Izlazni parametar procesa:
 - Stepen dekompozicije rastvora (%) = Y .

Vrednosti izmerenih ulaznih parametara procesa (X_1 – X_7) kao i vrednost izlaza procesa (Y), u formi deskriptivne statistike su prikazani u tabeli 4.8.

Na osnovu podataka u tabeli 4.8, može se uočiti da varijabla X_2 ima malu varijansu. Ipak, ova promenljiva predstavlja kaustični odnos rastvora i to je jedan od najvažnijih pampetara Bayer-ovog procesa i samim time nemože biti izostavljen iz dalje analize. Sa tehnološkog aspekta, i mala izmena vrednosti X_2 vodi do značajne promene brzine procesa i stepena razlaganja aluminatnog rastvora. Na primer, ukoliko se X_2 smanji sa 1.7 na 1.5, stepen dekompozicije (Y) će porasti sa 51 na 55%, uz sve ostale ulazne parametre održavane na konstantoj vrednosti.

Tabela 4.8. Vrednosti ulaznih (X_i) i izlaznih (Y) varijabila procesa razlaganja industrijskog rastvora natrijum aluminata – deskriptivna statistika za 500 linija podataka (Živković et al., 2010)

	Opseg	Minimum	Maksimum	Prosečna vrednost		Std. Devijacija	Variansa
				Statistika	Std. Greška		
X_1	12.3	144.0	156.3	150.944	0.0762	1.7030	2.900
X_2	0.2	1.5	1.7	1.530	0.0015	0.0329	0.001
X_3	3.4	1.3	4.7	2.285	0.0296	0.6617	0.438
X_4	11.0	58.0	69.0	64.656	0.0536	1.1988	1.437
X_5	22.2	36.3	58.5	50.582	0.1839	4.1121	16.909
X_6	37.7	87.2	124.9	106.473	0.3806	8.5098	72.416
X_7	76.0	49.0	125.0	77.080	0.6236	13.9437	194.426
Y	24.3	32.3	56.6	46.658	0.1241	2.7747	7.699

Kako bi se definisala korelaciona zavosnost u formi: $izlaz\ procesa\ (Y) = f\ ulaz\ procesa\ (X_1-X_7)$, urađena je bivarijantna korelaciona analiza. Kao rezultat ove analize, proračunati su Pearson-ovi korelacioni (PC) koeficijenti uz odgovarajuću statističku značajnost (Tabela 4.9).

Tabela 4.9. Korelaciona matrica za ulazne (X_1-X_7) i izlazne (Y) varijable za proces dekompozicije industrijskog rastvora natrijum aluminata (Živković et al., 2010)

		X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	Y
X1	Pearson-ovi korelac. Koefic.	1							
	Značajnost								
X2	Pearson-ovi korelac. Koefic.	-.319 ^{**}	1						
	Značajnost	.000							
X3	Pearson-ovi korelac. Koefic.	-.149 ^{**}	.361 ^{**}	1					
	Značajnost	.001	.000						
X4	Pearson-ovi korelac. Koefic.	-.150 ^{**}	.209 ^{**}	-.030	1				
	Značajnost	.001	.000	.500					
X5	Pearson-ovi korelac. Koefic.	.090 [*]	-.252 ^{**}	-.489 ^{**}	.214 ^{**}	1			
	Značajnost	.045	.000	.000	.000				
X6	Pearson-ovi korelac. Koefic.	.115 ^{**}	-.084	.458 ^{**}	-.040	.066	1		
	Značajnost	.010	.061	.000	.372	.139			
X7	Pearson-ovi korelac. Koefic.	-.125 ^{**}	.159 ^{**}	.421 ^{**}	-.156 ^{**}	-.716 ^{**}	-.147 ^{**}	1	
	Značajnost	.005	.000	.000	.000	.000	.001		
Y	Pearson-ovi korelac. Koefic.	-.143 ^{**}	.073	.447 ^{**}	-.108 [*]	-.720 ^{**}	-.227 ^{**}	.661 ^{**}	1
	Značajnost	.001	.101	.000	.016	.000	.000	.000	

**. Korelacija je značajna na 0.01 nivou.

*. Korelacija je značajna na 0.05 nivou.

Na osnovu napred navedenih činjenica o vrednostima korelacionih koeficijenata, da bi se definisala zavisnost izlaznog parametra, u funkciji ulaznih parametara, upotrebom MLRA metode, uz zadovoljavajući nivo fitovanja (jaka korelacija), neophodno je da su vrednosti PC blizu 0.5 uz statističku značajnost ($p < 0.05$) (Moroney, 1998; Živković et al., 2009b). Analiza podataka predstavljenih u tabeli 4.9, pokazuje da je ovaj uslov postignut u sledećim slučajevima: $Y - X_3$: PC = 0.447 ($p = 0.000$); $Y - X_5$: PC = -0.720 ($p = 0.000$); $Y - X_7$: PC = 0.661 ($p = 0.000$). Takođe, i sledeće međuzavisnosti prediktora (ulaznih varijabli) procesa isponjavaju taj uslov: $X_3 - X_5$: PC = -0.489 ($p = 0.000$); $X_7 - X_5$: PC = -0.716 ($p = 0.000$); $X_6 - X_3$: PC = 0.458 ($p = 0.000$); $X_7 - X_3$: PC = 0.421 ($p = 0.000$).

Uzevši u obzir da veliki broj varijabli ima zadovoljavajući nivo korelacije i statističku značajnost ($p < 0.05$), može se pretpostaviti da će MLRA analiza, kao alat linearog statističkog modelovanja, dati zadovoljavajuću jednačinu modela.

Kako bi naredna MLRA analiza imala adekvatnu bazu za samu izradu modela, i potom validaciju istog, pristupilo se sledećoj proceduri za polazni set izmerenih podataka procesa. Polazni skup od 500 linija podataka je podeljen u dve grupe. Prva grupa se sastojala od 350 (70%) linija podataka, odabranih upotrebom generatora slučajnih brojeva zasnovanog na Bernoulli-ovoj raspodeli (Bernoulli, 1690; Mihajlović et al., 2014); dok se druga grupa sastojala od preostalih 150 (30%) linija podataka. Prva grupa je korišćena za sam razvoj jednačine modela, dok je druga grupa korišćena za testiranje tako dobijene jednačine modela.

Jednačina linearne zavisnosti stepena razlaganja aluminatnog rastvora (Y) u funkciji uticajnih parametara tehnološkog procesa (X_1 - X_7) razvijena je upotrebom SPSS aplikacije, Verzija 17.0 (SPSS Inc., Chicago, IL, USA). Finalna jednačina modela, razvijena na prvoj grupi podataka (70%), ima sledeći oblik:

$$Y = 102.864 - 0.044 \cdot X_1 - 23.108 \cdot X_2 + 1.817 \cdot X_3 + 0.140 \cdot X_4 - 0.297 \cdot X_5 - 0.136 \cdot X_6 + 0.027 \cdot X_7 \quad (R^2 = 0.670)$$

Kako je već navedeno u prethodnom tekstu, i na slici 4.20., testiranje dobijenog MLRA modela je izvršeno upotrebom ANOVA testa. Rezultati ANOVA testa, razmatrane jednačine modela, prikazani su u Tabeli 4.10.

Tabela 4.10. Rezultati ANOVA testa za MLRA model razmatranog procesa

Model	Suma kvadrata (Sum of Squares)	Stepen slobode (df)	Srednja kvadratna vrednost (Mean Square)	F	Značajnost (Sig.)
Regresija(Regress.)	1772.337	7	253.191	99.341	0.000 ^a
Ostatak (Residual)	874.209	342	2.549		
Ukupno (Total)	2646.546	349			

a. Prediktori: (Konstante), X7, X4, X6, X2, X1, X5, and X3

b. Zavisna Varijabla: Y

Značajna vrednost F testa (Tabela 4.10) sugerije da je upotreba MLRA modela sa značajno visokim nivoom tačnosti. Takođe, prisutna je statistika značajnost (Sig.) vrednosti F statistike manja od 0.05, što znači da varijacije objašnjene modelom nisu izazvane slučajem. Odnos regresije prema ostatku je 67%:33%, što svedoči da je 67% promene zavisne varijable (Y) objašnjeno modelom. Rezultati koji predstavljaju sumarne vrednosti MLRA modela su prikazani u Tabeli 4.11.

Tabela 4.11. Sumarne vrednosti MLRA modela razmatranog procesa

Model	R	R ²	Prilagođeni R ²	Standardna greška procene
1	0.818 ^a	0.670	0.663	1.5965

a. Prediktori: (Konstanta), X7, X4, X6, X2, X1, X5, and X3

b. Zavisna Varijabla: Y

Koeficijent korelacijske (R) predstavlja nivo linearne korelacijske između izmerenih i modelom predviđenih vrednosti zavisne varijable procesa (Y). Velika vrednost ovog koeficijenta (0.818) govori o postojanju jake linearne korelacijske. R² je koeficijent determinisanosti i predstavlja kvadratnu vrednost višestrukog korelacionog koeficijenta. On pokazuje da približno 67% varijacije u vrednosti Y može da se opiše modelom, što je već i nagovešteno odnosom regresija : ostatak.

Kao dalja mera jačine modela, uporedjene su standardna greška predviđanja iz Tabele 4.11, sa standardnom devijacijom promenjive Y predstavljenom u tabeli deskriptivne statistike (Tabela 4.8). Zključak je sledeći: Bez prethodnog poznavanja promene X₁-X₇, najbolja prepostavka vrednosti Y bila bi oko 46.65 % uz standardnu devijaciju od 2.77. S druge strane, uz korišćenje MLRA modela, greška procene bi bila značajno manja, oko 1.59.

Na osnovu ovako dobijenih rezultata o MLRA modelu, moguće je tvrditi da se MLRA model može upotrebiti za predviđanje stepena dekompozicije aluminatnog rastvora sa zadovoljavajućom tačnošću, u posmaranom industrijskom procesu. Međutim, da bi se ta tvrdnja mogla dodatno podržati, neophodno je izvršiti analizu kolinearnosti dobijenog modela. Rezultati analize kolinearnosti su predstavljeni u Tabeli 4.12.

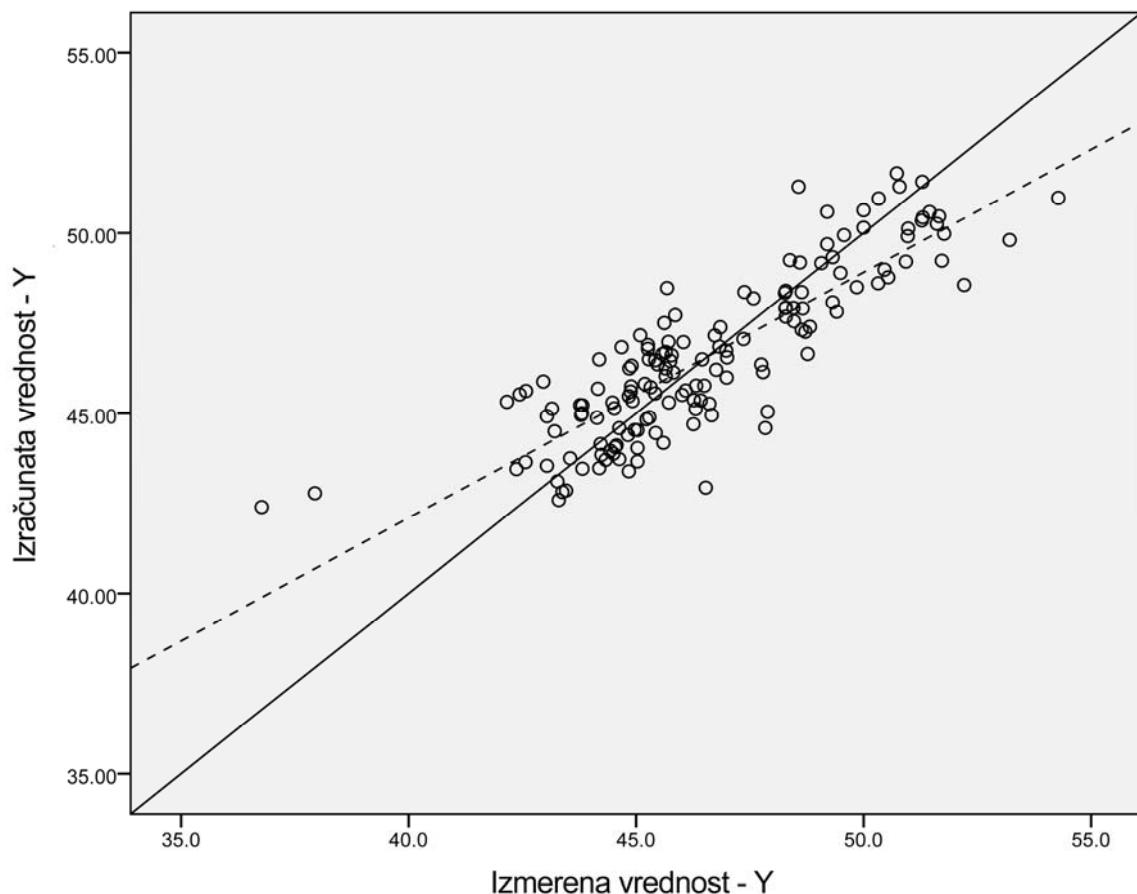
Tabela 4.12. Rezultati analize kolinearnosti razmatranog MLRA modela

Model	Korelacije (Correlations)			Analiza kolinearnosti (Collinearity Statistics)	
	Nulti red (Zero-order)	Parcijalna (Partial)	Delimična (Part)	Tolerancija (Tolerance)	Faktor porasta varijanse (VIF)
1	X ₁ -0.158	-0.043	-0.025	0.834	1.200
	X ₂ 0.072	-0.375	-0.233	0.702	1.425
	X ₃ 0.416	0.433	0.276	0.415	2.407
	X ₄ -0.078	0.098	0.057	0.894	1.119
	X ₅ -0.699	-0.452	-0.292	0.434	2.303
	X ₆ -0.266	-0.484	-0.317	0.579	1.726
	X ₇ 0.649	0.161	0.094	0.443	2.256

Na osnovu rezultata predstavljenih u Tabeli 4.12, može se zaključiti da model dobijen MLRA metodom nema izražen problem sa kolinearnošću. Za većinu prediktora nema oštrog pada vrednosti od nultog reda ka parcijalnoj i delimičnoj korelaciji. Takođe, vrednost koeficijenta tolerancije je dovoljno visoka za većinu promenjivih. Na taj način, npr., čak 83.4% varijacije promenjive X₁ nemože biti opisano drugim prediktorom. Što se tiče VIF faktora, vrednost iznad 2 može predstavljati izvesnu problematičnost predviđanja. Ipak, ovakva vrednost je prisutna samo kod varijabli X₃, X₅ i X₇, i to svega neznatno iznad ciljane vrednosti, te se može smatrati da razvijeni MLRA model može uspešno da se koristi za predviđanje koeficijenta razlaganja aluminatnog rastvora.

Nakon razvoja modela u prvoj fazi, testiranje samog MLRA modela je izvršeno na preostalih 30% polaznih podataka (ukupno 150 vektora). Tokom faze testiranja, izračunat je koeficijent determinacije (R^2) sa vrednošću od 0.731. Slika 4.23., ilustruje komparativni prikaz izmerenih i MLRA modelom proračunatih vrednosti izlazne veličine razmatranog procesa.

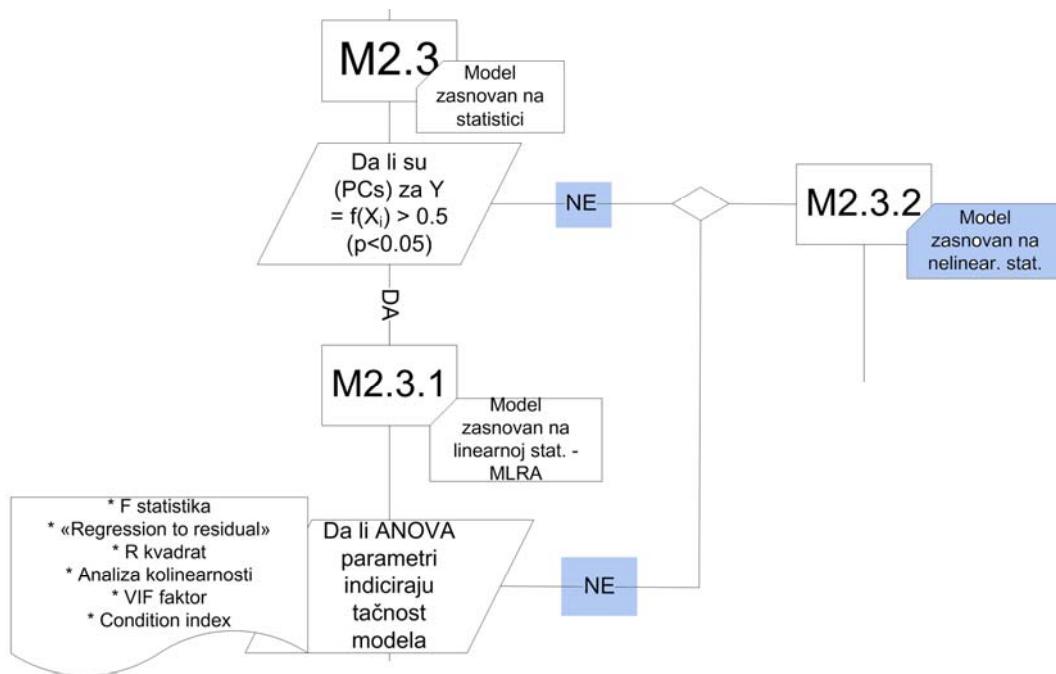
Na osnovu predstavljenih rezultata linearne korelacije podataka dobijenih iz industrijske prakse Bayer-ove tehnologije za proizvodnju glinice (Fabrika glinice Birač, Zvornik, BiH), može se zaključiti da se razvijeni MLRA model može sa dovoljnom tačnošću koristiti za predviđanje ishoda procesa, u funkciji ulaznih parametara. Takođe, razvijeni model se može koristiti i za optimizaciju procesa, jer se može vršiti analiza porasta izlazne vrednosti u funkciji kontrolisane promene ulaznih promenjivih modela.



Slika 4.23. Zavisnost između izmerenih i modelom proračunatih vrednosti stepena dekompozicije kaustičnog natrijum aluminatnog rastvora (— = idealna pozicija; --- = regresiona linija; o = vrednosti proračunate upotrebom MLRA modela)

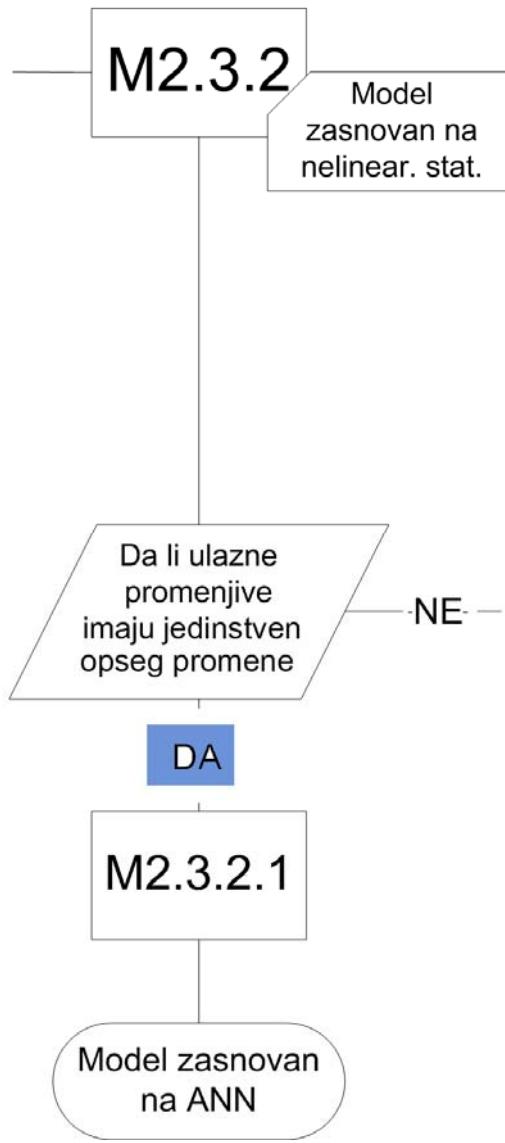
Ipak, nizak stepen korelacije između izlazne i ulaznih varijabila je čest slučaj u praksi. To ne znači automatski da međuzavisnost njihovog ponašanja ne postoji. To je samo dobar indikator da se ta međuzavisnost ne može opisati pristupom modelovanju zasnovanom na linearnoj statistici. U takvim slučajevima, za modelovanje posmatranog sistema - procesa treba primeniti metode

koje u obzir uzimaju nelinearnost dinamičkog ponašanja promenjivih (Djordjević et al., 2010). U najvećem broju slučajeva, tada su primenjivi alati modelovanja zasnovani na nelinearnoj statistici. Ovakav način modelovanja, koji se javlja kao ishod ukoliko su PC međusobnih korelacija varijabli manji od 0.5 ili bez statističkog značaja, u daljem tekstu će biti označen kao M2.3.2. (Slika 4.24).



Slika 4.24. Izbor pristupa modelovanju zasnovanom na nelinearnoj statističkoj analizi

Kako je na slici 4.24 prikazano, nelinearna statistička analiza je često izbor i u slučajevima kada je vrednost Pearson-ovih korelacionih koeficijenata dovoljno velika, ali rezultati ANOVA analize ne daju dobre pokazatelje linearne jednačine modela. U takvim slučajevima se dakle primenjuju metode nelinearne statistike, koje se opet mogu svrstati u dve različiti grupacije. Naime, zavisno od strukture ulaznih podataka procesa, donosilac odluka treba da se opredeli za jednu od postojećih mogućnosti modelovanja primenom nelinearnih statističkih metoda (Slika 4.25).



Slika 4.25. Izbor adekvatnog načina modelovanja za slučaj kada se sve ulazne promenjive mogu svrstati u isti opseg

Ukoliko je odgovor na pitanje postavljeno na slici 4.25 – „DA“, tada se primenjuju tehnike za modelovanje sistema čije ulazne promenjive imaju jedinstven opseg. Kao čest metod modelovanja u ovakvim slučajevima se koriste Veštačke Neuronske Mreže (Artificial Neural Networks – ANNs) (Abdul-Wahab and Al-Alawi, 2002; Al-Alawi, et al., 2008; Ozdemir et al, 2008; Mihajlović et al., 2010b; Smiljanić et al., 2011; Đurić et al., 2012). Za slučaj kada ulazne varijable sistema, tokom celog perioda posmatranja, imaju više od jednog opsega promene

(odgovor „NE“ – na slici 4.25) primenjuju se metode modelovanja zasnovane na Fazi logičkom („Fuzzy Logic“) pristupu. Kao najčešća od njih javlja se metoda fazi sistema zaključivanja sa adaptivnom mrežom („Adaptive-Network-Based Fuzzy Inference System - ANFIS“) (Noori et al., 2010; Joihanyak and Kovacs, 2011; Mihajlović et al., 2013a; Mihajlović et al., 2014a).

Pristup modelovanju zasnovan na ANN će u daljem tekstu biti označen kao M2.3.2.1. Veštačke neuronske mreže se obično u literaturi predstavljaju kao nelinearni pristup multivarijantnim statističkim metodama, koje nisu ograničene pretpostavkama normalne raspodele ili linearnosti razmatranih sistema (Demuth, 2002). Iako se neuronske mreže potekle van polja statistike i čak su jedno vreme posmatrabne kao alternativa statističkim metodama, u savremenoj literaturi se zapravo posmatraju nadogradnjom klasične statističke analize (Demuth, 2002; Živković et al., 2009b; Mihajlović et al., 2010b; Đurić et al., 2012).

Metodologija modelovanja primenom veštačkih neuronskih mreža, biće predstavljena na slučaju modelovanja jednog značajno ekološkog problema u tehnologiji ekstrakcije bakra pirometalurškim postupkom u kompaniji RTB Bor (Mihajlović et al., 2010b). Naime, u savremenim uslovima industrijske proizvodnje, ekologija se tretira kao vitalni aspekt gotovo svih novih projekata. Na taj način, kao i razvojem ekološkog menadžmenta kao naučnog polja, došlo je do porasta broja metoda i tehnika koje se mogu primeniti kao alati za unapređenje ekoloških pokazatelja industrijskih procesa. U savremenom pristupu kontroli ekoloških parametara tehnoloških procesa, savremeni matematičke metode predviđanja se široko upotrebljavaju. Razlog neophodnosti predviđanja ponašanja tehnoloških parametara, u različitim uslovima, je mogućnost predviđanja potencijalne opasnosti tehnologije. Jedan od alata koji se može koristiti za modelovanje u ove svrhe su i Veštačke Neuronske Mreže (ANN). U radu (Mihajlović et al., 2010b), predstavljen je pokušaj da se ANN metodologija primeni za modelovanje jednog od važnih aspekata proizvodnje bakra u plamenoj peći – emisije SO₂ gasa.

Naime, sam objekt modelovanja bila je emisija sumpor dioksida (SO₂) u okruženju topionice bakra, koja se kontinualno meri na dva merna mesta u gradu Boru. Ulazne promenjive modela bile su količina obrađenog koncentrata bakra u plamenoj peći i količina proizvedene sumporne kiseline. Pored toga, kao uticajni parametri modela, korišćeni su meteorološki parametri: godišnje doba, brzina vetra, pravac vetra, temperatura vazduha, vlažnost i barometarski pritisak, koji su izmereni na istim mernim stanicama kao i koncentracija SO₂ u vazduhu. Važan parametar je takođe bilo i rastojanje od merne stanice do topinice bakra, obzirom da se dve odabrane merne stanice nalaze na različitim rastojanjima od topioničkog dimnjaka. Jedna merna stanica je smeštena u Gradskom parku, dok je druga na takozvanoj lokaciji „Jugopetrol“ (Slika 4.26).

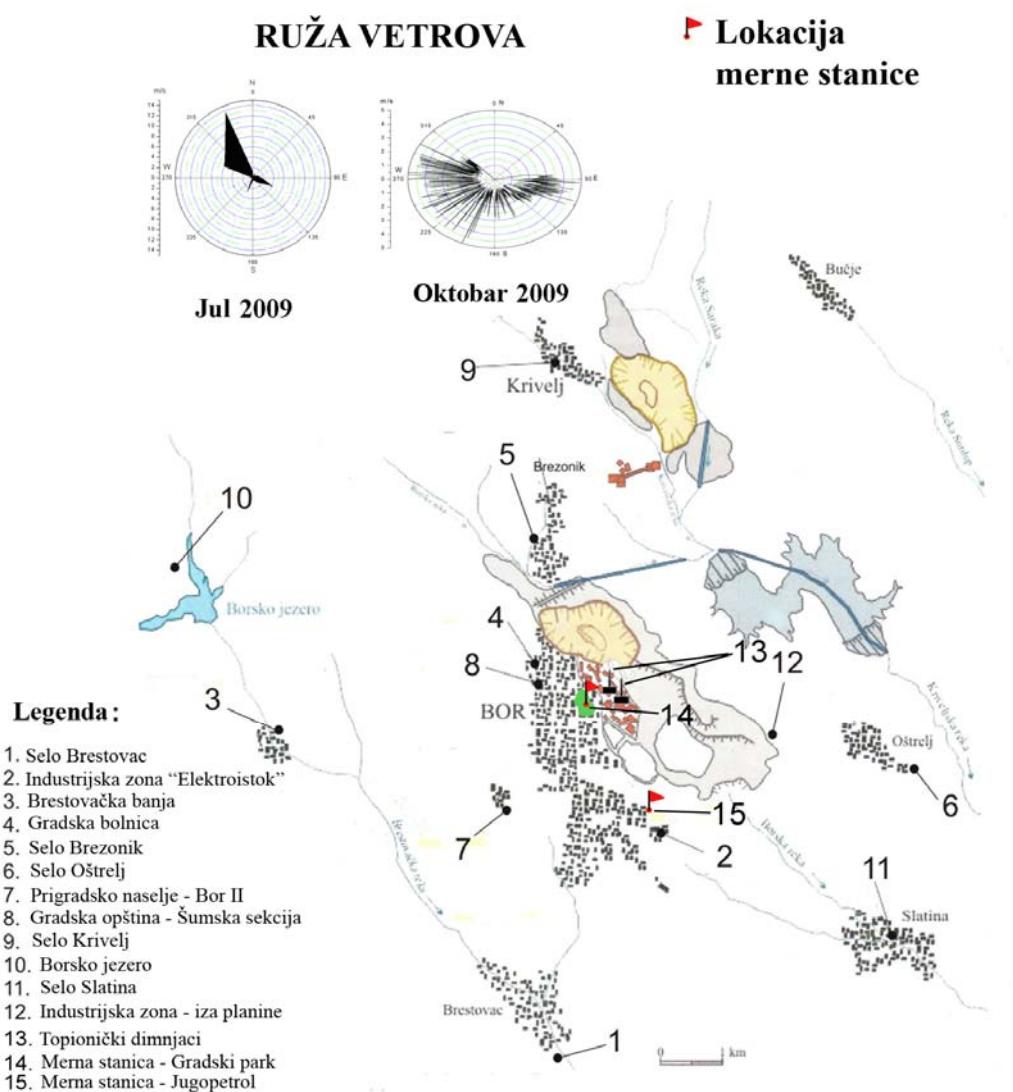
Tabela 4.12. Predstavlja prosečnu koncentraciju SO₂ gasa detektovanog u vazduhu, u okolini topionice bakra, tokom 2009. godine, izmereno na obe navedene lokacije. Na osnovu poslednje kolone u ovoj tabeli, očigledno je da se emisija iznad zakonom limitirane koncentracije događala svakog meseca. Ovaj ekološki problem je još i veći ukoliko se uzme u obzir da je topionica locirana u samom centru grada (Slika 4.26). Granična koncentracija SO₂ koja je dopuštena u urbanim zonama, određena je od strane Svetske Zdravstvene Organizacije i iznosi 350 µg/m³ (WHO, 2001). Ista granična koncentracija je definisana i od strane EU komisije (1999/30/CE), pri čemu je ova regulativa obavezujuća za zemlje članice kao i za zemlje kandidate za članstvo u EU. Republika Srbija takođe ima zakonsku regulativu koja definiše maksimalnu koncentraciju toksičnih gasova u vazduhu u urbanim sredinama. Prema ovoj regulativi, granica je takođe 350 µg/m³.

Uzevši u obzir opasnost koja rezultuje od povišene emisije SO₂, u Boru je instaliran „Continuous Operational Real-Time Monitoring System (CORTMS)“, još tokom 2003. godine. Ovaj sistem omogućuje kontinualno merenje koncentracije SO₂ u vazduhu, pri čemu se vrednosti očitavanja direktno smeštaju u bazu podataka sa merne stanice. Naravno, ovaj sistem može samo da detektuje povišene koncentracije SO₂ gasa u vazduhu, nakon njihovog nastanka. Do sada, ovi podaci nisu korišćeni za predikciju i prevenciju emisije povišenih koncentracija SO₂ u gradu. Verovatni razlog za to je u nepostojanju organizovanog razvoja metoda predviđanja, zasnovanih na matematičkom modelu, u kompaniji u sklopu koje posluje Topionica bakra u Boru. Samim time, navedeni problem emisije SO₂ u gradu Boru je još uvek prisutan, o čemu svedoče i rezultati predstavljeni u referenci (Đorđević et al., 2013). U navedenom radu su predstavljena prekoračenja koncentracije SO₂ detektovana na mernim mestima u Boru, tokom 2011. godine.

U radu (Mihajlović et al., 2010b) izvršen je pokušaj da se sa raspoloživim i javno dostupnim podacima merenja koncentracije SO₂ u vazduhu, kao i meteoroloških parametara, uz dodatak podataka o parametrima proizvodnje u topionici, napravi model predviđanja povišene koncentracije SO₂, zasnovan na veštačkim neuronskim mrežama.

U ranijem istraživanju bilo je pokušaja da se isti problem reši analitičkim pristupom (Mihajlović et al. 2008). Ovakav pristup je rezultovao jednačinom modela koja se može koristiti za predviđanje emisije SO₂, prema napred navedenim tehnološkim parametrima, sa tačnošću od 78% ($R^2 = 0.78$). Takođe, isti ovaj problem, iz ugla uticaja tehnoloških i meteoroloških parametara na zagađenje vazduha sa SO₂ i teškim metalima u čestičnom obliku (PM₁₀) analiziran je upotrebom multikriterijumske analize (Nikolić et al., 2010). Kao rezultat dobijen je dokaz uticaja meteoroloških parametara na niže ili više prisustvo toksičnih komponenti u vazduhu.

Međutim, u radu (Nikolić et al., 2010) nije učinjen pokušaj predviđanja prekoračenja emisije SO₂, u funkciji uticajnih parametara, dok u radu (Mihajlović et al., 2008) nije postignuta zadovoljavajuća tačnost predviđanja. Iz tog razloga je u radu (Mihajlović et al., 2010b) učinjen jedan korak više, i modelovanje razmatranog problema je izvršeno promenom ANN metodologije.



Slika 4.26. Depozicija grada Bora sa indiciranim mernim stanicama (Nikolić et al., 2009)

Tabela 4.12. Deskriptivna statistika emisije SO₂ u toku 2009. godine

Mesec	Merna stanica	Minimum, µg/m ³	Maksimum, µg/m ³	Srednja vrednost, µg/m ³	Std. Devijacija	Procenat vremena iznad granične vrednosti, %
Januar	1	0	4 398	45.78	298.92	2.9
	2	0	2 398	34.56	345.23	15.3
Februar	1	5	4 989	56.78	234.34	14.4
	2	0	5 367	207.34	342.45	25.3
Mart	1	10	4 230	67.9	245.45	13.3
	2	0	5 193	203.45	433.34	18.0
April	1	0	3 145	165.45	354.21	16
	2	0	3 678	196.56	324.2	15
Maj	1	0	4 321	126.45	453.21	11.3
	2	0	4 567	23.45	125.67	1.9
Jun	1	0	3 453	167.23	345.34	8.05
	2	0	4 876	198.23	457.23	19.58
Jul	1	0	5 257	106.21	351.627	16.1
	2	0	4 247	194.55	472.985	8.7
Avgust	1	0	2 345	78.92	342.34	8.3
	2	0	3 465	101.23	324.56	16.5
Septembar	1	0	2 345	56.78	234.56	7.3
	2	0	2 435	52.34	256.45	6.5
Oktobar	1	10	2 394	206.98	424.851	11.6
	2	0	3 990	86.55	392.172	19.25
Novembar	1	0	3 435	201.23	435.23	16.4
	2	0	4 321	212.23	456.23	18.8
Decembar	1	0	2 879	123.45	345.67	12.3
	2	0	3 245	145.67	345.23	13.45

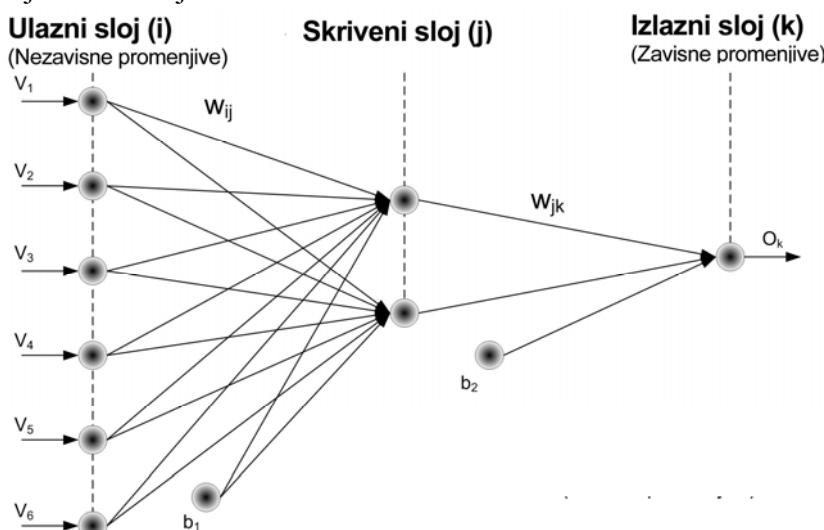
1-merno mesto *Gradski park*2-merno mesto *Jugopetrol*

Same neuronske mreže predstavljaju oblast veštačke inteligencije koje su u poslednjih 20-tak godina prošle kroz brzu evoluciju i progres (Eldin and Senoussi, 1995). Tokom poslednjih 15 godina, veštačke neuronske mreže (ANN) i posebno „feed forward“ veštačke neuronske mreže sa prostiranjem informacije unapred (FANN) su ekstenzivno primenjivane u modelovanju procesa, i njihova primena u industrijii rapidno raste (Ungar et al., 1996). Upotreba ovakvih mreža se takođe može uočiti za veliki broj predviđanja u ekološkom menadžmentu, kao što je npr. efekat staklene baštne (Seginer et al., 1994), ili simulacija N₂O emisije u različitim urbanim ekosistemima (Ryan et al., 2004). Takođe, javlja se i ekspanzija opšte primene ANN u

modelovanju različitih oblasti industrijske prakse (Lak et al., 1996; Fullana et al., 2000; Chouai et al., 2000; Cilek, 2002; Jorjani et al., 2007).

Osnovna prednost ANNa je mogućnost da se izvrši modelovanje problema upotrebom primera (odnosno, na osnovu podataka iz prakse), a ne na opisivanju problema analitički. ANN su takođe veoma moćne kod efektivnog predstavljanja kompleksnih nelinearnih sistema. Neuronske mreže se takođe smatraju nelinearnom statističkom identifikacionom tehnikom (Demuth and Beale, 2002).

Za razvoj nelinearnog ANN modela sistema, najčešće se koristi arhitektura mreže sa prostiranjem informacije unapred („feed-forward“) koja se još naziva i „višeslojni perceptron“ (MLP – multilayer perceptron). Ovakva mreža se obično sastoji od hijerarhijske strukture tri tipa slojeva koji se opisuju kao ulazni, skriveni (može ih biti i više) i izlazni sloj. Svi slojevi se sastoje od određenog broja peocesnih čvorova. Svaki čvor u ulaznom sloju je povezan sa svim čvorovima u skrivenom sloju preko težinskih konekcija (w_{ij}). Slične konekcije postoje između skrivenih i izlaznih slojeva. U ulaznom sloj težinski koeficijenti su zapravo dobijeni na osnovu vrednosti ulaznih promenjivih. Svaki naredni sloj ima težinske koeficijente koji dolaze od prethodnih slojeva (w_{jk}). Takođe svaki sloj ima tzv. „bias“ čvor (čvor koji ima fiksnu vrednost izlazne veličine od +1). Poslednji sloj zapravo predstavlja izlaz mreže (Demuth and Beale, 2002). Primer višeslojne neuronske mreže sa prostiranjem informacije unapred („feed-forward“) je predstavljen na slici 4.27. Ova mreža ima ulazni sloj sa šest neurona, jedan skriveni sloj sa dva neurona i jedan izlazni neuron u izlaznom sloju, usled postojanja jedne izlazne veličine sistema koji se modeluje.



Slika 4.27. Arhitektura troslojne neutronske mreže sa prostiranjem informacije unapred (b_1 i b_2 su „bias“ čvorovi). Strelice pokazuju tok informacije tokom predikcije

Vrednosti koje ulaze u ulazni sloj su zapravo vrednosti koje su eksperimentalno dobijene merenjem na razmatranom sistemu, te je samim time broj čvorova u ulaznom sloju jednak broju odabranih ulaznih parametara procesa koji se želi modelovati. Inače, u opštem slučaju, se brojevi čvorova smeštenih u ulaznom, skrivenim i izlaznom sloju označavaju sa i, j i k , respektivno. Očigledno je da su vrednosti i i k , determinisane brojem ulaznih i izlaznih veličina procesa koji se želi modelovati, respektivno. Broj čvorova u skrivenom sloju – vrednost j , može biti različita. Često se arhitektura ANN sistema pokušava sa više različitih mreža koje se sastoje iz različitog broja čvorova u skrivenom sloju, sve do dobijanja optimalnih vrednosti predviđanja. Samim time, broj skrivenih čvorova (j) je parametar koji se može podešavati i opseg vrednosti može zavisiti od nivoa željene aproksimacije i mogućnosti generalizacije mreže (Dreyfus, 2004).

Ulas u bilo koji neuron j , bez bijas vrednosti se može predstaviti kao (Živković et al., 2009):

$$I_j = \sum W_{ij} \cdot X_j \quad (4.21)$$

Gde su: W_{ij} težinski koeficijenti interkonekcija između neurona i i j ; X_j predstavlja signal razmatrane konekcije. Značajne komponente ANNa su aktivacione funkcije koje se javljaju nakon ulaznog sloja. Svaki skriveni neuron, kao i izlazni neuron, primenjuje aktivacionu funkciju za svoj mrežni izlaz. U literaturi se javlja pet najčešće korišćenih aktivacionih funkcija, koje su predstavljene u Tabeli 4.13.

Tabela 4.13. Tipovi aktivacionih funkcija

Slučaj	Naziv aktivacione funkcije	Jednačina
1	Log sigmoid funkcija (<i>logsig</i>)	$Y_i = 1/(1+\exp(-net\ i))$
2	Tan hyperbolic funkcija (<i>tansig</i>)	$Y_i = \tanh(net\ i)$
3	Linearna funkcija (<i>purelin</i>)	$Y_i = (net\ i)$
4	„Radial basis“ funkcija (<i>radbas</i>)	$Y_i = \exp[-(net\ i)^2]$
5	„Triangular basis“ funkcija (<i>tribas</i>)	$Y_i = 1 - \text{abs}(net\ i) \text{ if } -1 \leq (net\ i) \leq 1; \text{ otherwise, } Y_i = 0$

Za slučaj koji je modelovan u radu (Mihajlović et al., 2010b), kao aktivaciona funkcija korišćena je funkcija br. 1 (*logsig*). Ova funkcija se najčešće i koristi kod modelovanja sličnih sistema (Aldrich, et al., 1994; Zeng i Chen, 1997; Meradi et.al., 2006):

$$f(x) = 1 / (1 + e^{-x}) \quad (4.22)$$

Ukupna transfer funkcija neurona je tada struktuirana na sledeći način:

$$O_j = A_j = f(\sum W_{ij} \cdot X_j) \quad (4.23)$$

U jednačini 4.23, O_j je izlaz neurona, A_j je aktivaciona funkcija, X_j je ulaz u neuron skrivenog sloja koji je identičan kao izlaz prethodnog neurona ulaznog sloja, sa indeksom j koji se odnosi na posmatrani element. Cilj procesa učenja je da minimizira ukupnu grešku mreže:

$$E = \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - O_i)^2} \quad (4.24)$$

U jednačini (4.24) y_j su ciljane izlazne vrednosti.

Na adaptaciju težinskih parametara se utiče prema jednačini (Meradi, et al., 2006):

$$\Delta W_{ij} = W_{ij} \cdot (t + 1) - W_{ij}(t) = -\alpha \cdot \partial E / \partial W_{ij} \quad (4.25)$$

Gde je α definisano kao brzina učenja, što rezultuje sa:

$$\Delta W_{ij} = \alpha \cdot \beta_j \cdot X_j \quad (4.26)$$

Gde se lokalna greška skrivenog elementa računa preko:

$$\beta_j = f(I_j) \cdot \sum \beta_k \cdot W_{jk} \quad (4.27)$$

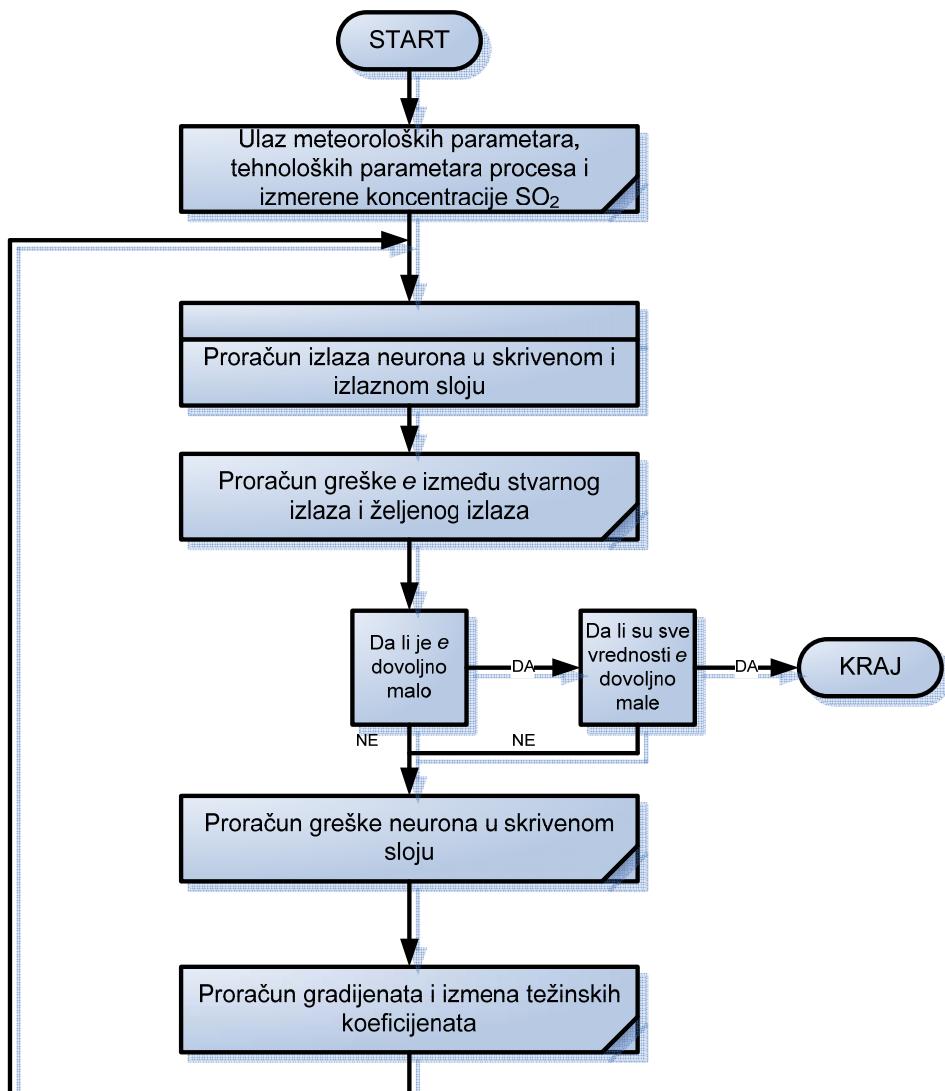
U jednačini 4.27, komponente β_k predstavljaju greške elemenata u narednom sloju, dok W_{jk} predstavljaju težinske koeficijente veza tih elemenata. Greška neurona izlaznog sloja je dobijena preko jednačine:

$$\beta_k = f(I_k) \cdot (y_k - O_k) \quad (4.28)$$

Greška se prvenstveno izračunava i potom vraća („back propagated“) u skriveni sloj koji se nalazi ispred izlaznog sloja. Težinski koeficijenti veza se potom mogu modifikovati prema proračunatim vrednostima ΔW_{ij} (jednačina 4.26) u zaključnim stadijumima ovog procesa. Da bi se rešio problem lokalnog minimuma prostora greške, uveden je član „momentum“. Samim time se jednačina prilagođavanja težinskih koeficijenata može modifikovati na sledeći način:

$$\Delta W_{ij}(t) = \alpha \cdot \beta_j \cdot X_j + \mu \cdot \Delta w_{ij} \cdot (t-1) \quad (4.29)$$

Vrednost μ se definiše kao momentum (momenat), t je trenutni stadijum učenja, dok je $(t-1)$ prethodni stadijum učenja. Algoritam treniranja po principu „backpropagation“ je iterativni gradijentni algoritam koji je dizajniran da minimizira glavnu kvadratnu grešku između predviđenih i željenih izlaza. Algoritam za „backpropagation“ trening, koji je korišćen u ovoj studiji je prikazan na slici 4.28. za razmatrani proces modelovanja.



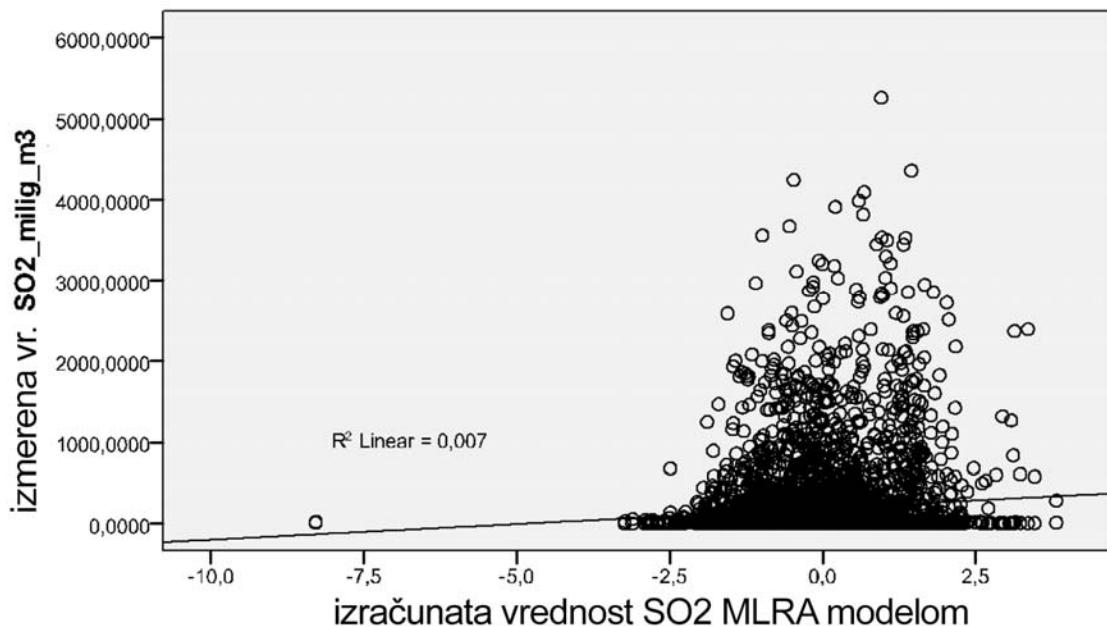
Slika 4.28. Dijagram toka „beckpropagation“ algoritma učenja (na osnovu Živković et al., 2009)

Sama primena neuronskih mreža u konkretnom slučaju se obično sastoji od tri faza. Prva je faza treninga, koja se zasniva na 70-80% slučajno odabranih podataka iz polazne baze podataka. Tokom ove faze, korekcija težinskih parametara konekcije se postiže preko neophodnog broja iteracija, sve dok srednja kvadratna greška između izračunatih i izmerenih izlaza mreže ne postane minimalna. Tokom druge faze, preostalih 20-30% podataka se koristi za testiranje „istrenirane“ mreže. U ovoj fazi, mreža koristi težinske parametre određene tokom prve faze (Živković et al., 2009b). Podaci o ulaznim vrednostima koji se uvode u mrežu tokom faze testiranja, a koji nisu korišćeni tokom faze učenja mreže, se sada uključuju kao nove vrednosti ulaza (X_i) i transformišu se u nove izlaze (Y_i). Treća faza je validacija mreže na novom setu podataka. U ovoj fazi se obično koriste podaci dobijeni tokom novog seta eksperimentalnog merenja na istom sistemu (istom procesu). Faza validacije predstavlja finalni nivo uspešnog ili neuspešnog predviđanja dobijenog upotreboom mreže razvijene u dva prethodna stadijuma, ali sada na novom setu podataka (Đurić et al., 2012).

Kako je već navedeno, u radu Mihajlović et al., 2010, za modelovanje ekološkog problema pojačane emisije SO_2 gasa u okolini topionice bakra u Boru, korišćeni su tehnološki parametri samog procesa, meteorološki parametri i koncentracija SO_2 u vazduhu izmerena na dva merna mesta. Sama baza podataka se sastojala od 5048 linija podataka.

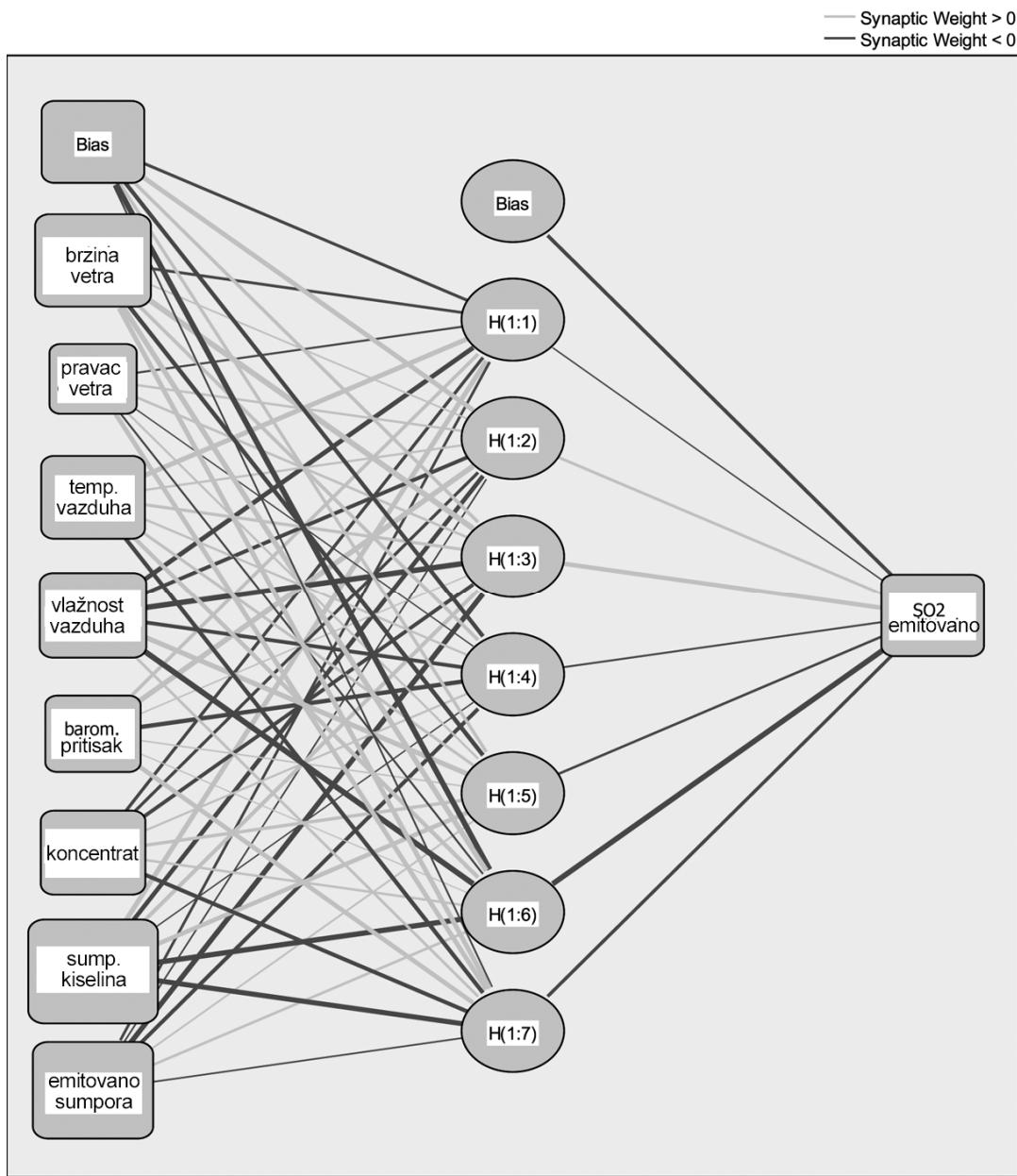
Obzirom da su limiti analitičkog modelovanja navedenog ekološkog problema izučavani prethodno i predstavljeni u radu (Mihajlović et al., 2008), kao i mogućnost primene multikriterijumske analize (Nikolić et al., 2009), sledeći korak istraživanja uključivao je testiranje postojanja mogućnosti matematičkog modelovanja zasnovano na statističkim metodama. Shodno proceduri opisanoj u ovom poglavlju, prvo je izvršen pokušaj modelovanja razmatranog sistema primenom linearne statističke zavisnosti između zavisne promenjive (koncentracija SO_2 u vazduhu) i nezavisnih promenjivih (tehnološki i meteorološki parametri) modela. Finalni rezultat proračuna linearne korelacije između detektovane SO_2 emisije u vazduhu i svih ulaznih parametara (tehnoloških i metroroloških) su predstavljeni na slici 4.29. U svrhe modelovanja primenom linearne statističke analize upotrebljena je MLRA metodologija.

Na osnovu rezultata predstavljenih na slici 4.29., očigledno je da je dobijena izuzetno niska značajnost linearne zavisnosti između objekta modelovanja (detektovana koncentracija SO_2 u vazduhu) i ulaznih parametara ($R^2 = 0.007$). Ovo je dovoljan indikator da se istraživani sistem ne može adekvatno opisati linearnim matematičkim modelom. Iz tog razloga, dalji proces modelovanja je izvršen primenom metodologije nelinearne statističke analize, koji je primenjivan i od strane drugih istraživača (Lak et al., 1996; Paruelo i Tomasel, 1997; Demuth i Beale, 2002).

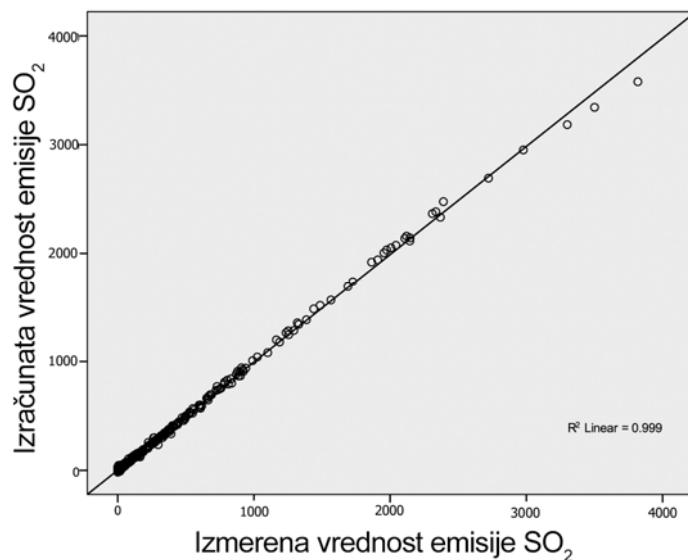


Slika 4.29. Rezultati MLRA analize istraživanog problema

ANN arhitektura, primenjena u ovom radu (Slika 4.30), uključivala je ulazni sloj sa osam neurona (uključujući tehnološke i meteorološke parametre). Optimalni broj neurona u skrivenom sloju bio je sedam, dok je izlazni sloj sadržao samo jedan neuron (predviđanje koncentracije SO₂ u vazduhu). Slika 4.30, predstavlja arhitekturu primenjene mreže. Ukupan broj linija podataka je bio 5048. Odabrana struktura modela se sastojala od 3534 uzoraka za trening (70%) i preostalih 1514 uzoraka za testiranje (30%) mreže. Slika 4.31, predstavlja rezultate modelovanja dobijenog upotrebom ANN metodologije, kao poređenje vrednosti dobijenih predviđanjem mreže (tokom faze testiranja) i stvarno izmerenih vrednosti (Kemp et al., 2007).

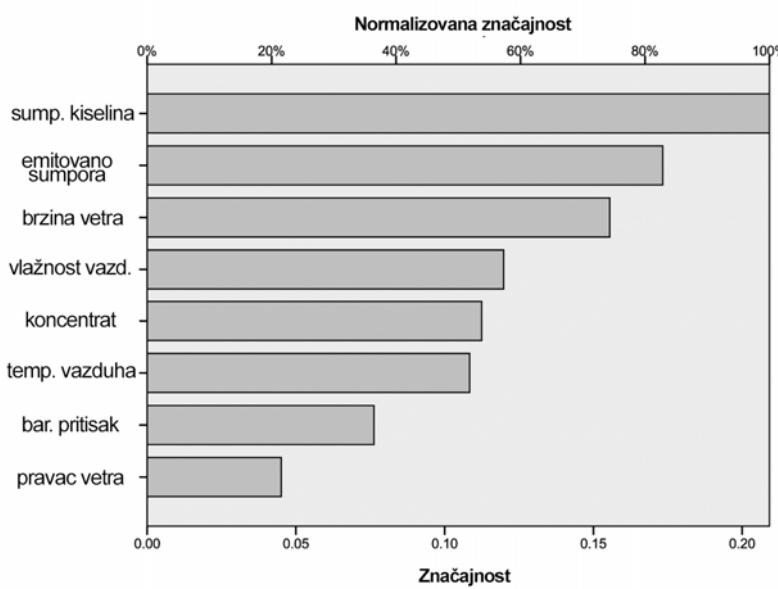


Slika 4.30. Arhitektura primenjene neuronske mreže



Slika 4.31. Rezultati predviđanja SO_2 emisije ANN modela upoređeni sa stvarno izmerenim vrednostima

Očigledno je da postoji visok nivo fitovanja koji je ostvaren ANN metodologijom ($R^2 = 0.999$). Slika 4.32 predstavlja važnost svakog pojedinačnog ulaznog parametra na izlaz modela. Za model dobijen u predstavljenom primeru, najznačajniji ulazni parametar bio je količina proizvedene sumporne kiseline, što je logičan i očekivani ishod.

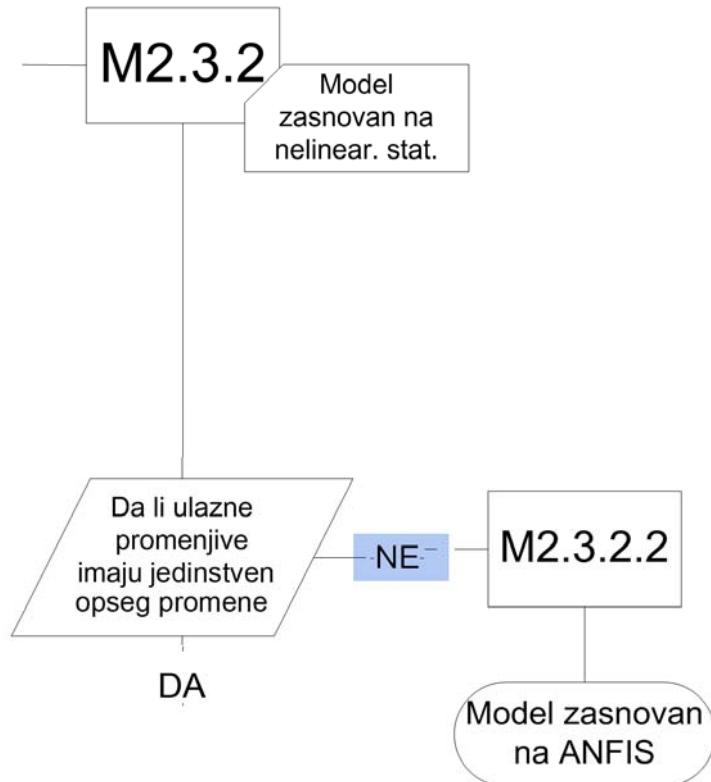


Slika 4.32. Značajnost uticaja svakog od ulaznih parametara modela na ishod predviđanja izlazne veličine

Model predstavljen u ovom radu, nažalost se ne može koristiti za unapređenje tehnološkog procesa primjenjenog u ovoj topionici bakra,. Ipak, može biti svojevrsna indirektna zaštita stanovništva u gradu koje je izloženo povećanoj koncentraciji SO₂ u vazduhu. Suština ove indirektnе zaštite može se opisati na sledeći način. Meteorološki parametri kao što su: brzina vетра i правac ветра, температура, влажност vazduha i barometarski pritisak, mogu se predvideti sa значајном preciznošćу за limitirani interval vremena u budućnosti. Prema tome, matematički model opisan u ovom radu, zasnovan na predviđanju meteoroloških parametara i tehnoloških parametara koji rezultuju iz plana proizvodnje za budući period, mogu se upotrebiti za predviđanje potencijalne povišene emisije SO₂ u vazduhu. Na taj način, za one dane u godini, za koje je pretpostavljena povišena emisija, može se vršiti korekcija proizvodnog plana koja uključuje smanjenje količine koncentrata koji će se preraditi i povećanje proizvodnje sumporne kiseline. Ovakve korekcije se, na nivou simulacije, mogu ponavljati iteraciono sve dok se predviđena koncentracija SO₂ ne smanji ispod oraničavajućeg nivoa od 350 µg/m³ (WHO, 2001). Na taj način, pravilno upravljanje količinom sumpora koja ulazi u operaciju topljenja, za određene dane u godini kada su nepovoljni meteorološki parametri, može omogućiti kontrolu emisije SO₂ u okolini istraživanog kompleksa topionice bakra.

Naravno pristup modelovanju zasnovan na ANN može se primeniti i za slučaj predviđanja vrednosti više od jednog izlaznog parametra sistema. Primer takvog modelovanja je tehnološki proces čije je modelovanje predstavljeno u radu (Smiljanić et al., 2011). Ovaj rad predstavlja pokušaj da se definiše nelinearna korelaciona zavisnost između četiri izlaznih varijabli procesa razlaganja aluminatnog rastvora, kao dela Bayer-ovog procesa, opisanog u prethodnom tekstu. Osim, činjenice da se u izlaznom sloju umesto jednog nalazi četiri neurona, modelovanje i sam proces izrade arhitekture mreže je identičan već opisanoj proceduri ANN modelovanja, te nema potrebe ponovo je opisivati.

Naravno, pored niza prednosti i ANN metodologija ima određene nedostatke. Osnovni nedostatak ove metodologije je u činjenici da nije adekvatna za slučaj ulaznih promenjivih sistema koje imaju više od jednog opsega promene. U tom slučaju bi odgovor na pitanje: „Da li ulazne varijable imaju jedinstven opseg promene?“ bio „NE“. Samim time, za takav slučaj je primenjivija metodologija koja karakter promene ulaznih promenjivih deli na veći broj segmenta. Kao primer takve nelinearne metode modelovanja može se uzeti „Adaptive-Network-Based Fuzzy Inference System“ ili skraćeno ANFIS (Slika 4.33).

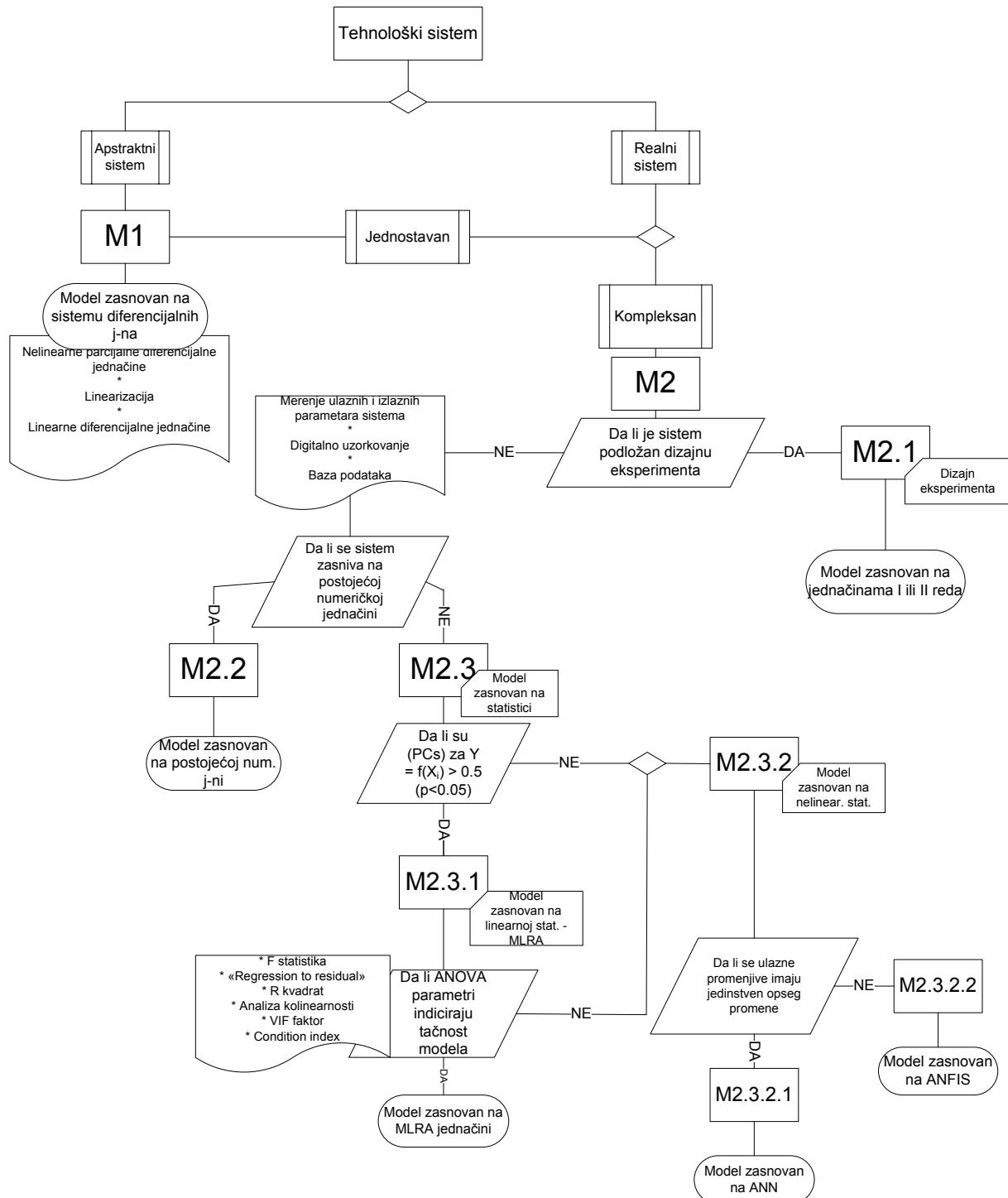


Slika 4.33. Izbor adekvatnog načina modelovanja za slučaj kada ulazne promenjive nemaju jedinstven opseg promene

Metodologija konstrukcije ANFIS modela, na konkretnom primeru tehnološkog procesa će biti predstavljena u sledećem poglavlju.

Sada je, na osnovu primera i razmatranja predstavljenih u prethodnom tekstu, moguće dati konačni izgled algoritma za selekciju adekvatnog modela procesa razvijenog na osnovu strukture ulaznih podataka (Slika 4.34).

Navedeni algoritam zapravo prati proceduru i tok selekcije zasnovan na karakteristikama samog sistema koji se modeluje (struktura, ulazne i izlazne veličine), te se, na osnovu datih kriterijuma, može upotrebiti kao alat kod donošenja odluka koji bi od raspoloživih metoda modelovanja bio najprihvatljiviji. Na osnovu karakteristika algoritma, njegov akronim u daljem tekstu će biti ASAMA (Algorithm for Selection of Adequate Modeling Approach).



Slika 4.34. Algoritam za selekciju adekvatnog načina modelovanja tehnološkog procesa zasnovano na strukturi ulaznih podataka

5. PRIMENA ASAMA ALGORITMA U MODELOVANJU REALNOG TEHNOLOŠKOG SISTEMA

U ovoj disertaciji je, na osnovu praktičnih primera razvoja matematičkih modela kompleksnih tehnoloških sistema, razvijen algoritam za selekciju adekvatnog modela procesa na osnovu strukture ulaznih podataka (*Algorithm for Selection of Adequate Modeling Approach*, odnosno ASAMA). Obzirom da navedeni algoritam sistematično predstavlja kriterijume za selekciju najadekvatnijeg pristupa modelovanju kompleksnih tehnoloških sistema, može biti od koristi donosiocima odluka u praksi. Kako bi se pokazala primenjivost navedenog algoritma, u daljem tekstu je obrađen jedan segment kompleksne Bayer-ove tehnologije proizvodnje glinice - luženje boksita. Navedeni sistem je modelovan većim brojem različitih pristupa što je omogućilo komparaciju dobijenih finalnih valjanosti modela na osnovu kriterijuma predstavljenih u ASAMA algoritmu.

Prema tome, kao primer primene algoritma razvijenog u ovoj disertaciji, predstavljenog u prethodnom poglavlju, biće opisani rezultati publikovani u radu datom referencom (Mihajlović et al., 2014a). Ovaj rad predstavlja rezultate modelovanja procesa luženja boksita, koji je deo Bayer-ove tehnologije proizvodnje glinice. Sama Bayer-ova tehnologija, iz ugla razlaganja aluminatnog rastvora je opisana u prethodnom poglavlju.

Međutim, u radu (Mihajlović et al., 2014a), obrađen je segment luženja boksita. Naime, Bayer-ov proces uključuje luženje boksita pod visokim pritiskom u koncentrovanom rastvoru natrijum hidroksida (kaustičnom) na temperaturama u opsegu od 373 K (100°C) do 523 K (250°C), zavisno od minearloške forme aluminijum hidroksida u boksitu (Whittington et al., 1998; Jamialahmadi and Muller-Steinhagen, 1998; Palmer et al, 2003).

Proces luženja, pored rastvaranja korisnih jedinjenja aluminijuma, uključuje i reakcije sa rastvornim jedinjenjima silicijuma i titan dioksida, pod određenim uslovima (Chelgani i Jorjani, 2009). Brzina procesa luženja aluminijum hidroksida zavisi od njegove mineralne forme u boksitu. Trihidratni tip boksita – gibsit – može se u kaustičnom rastvoru rastvarati u opsegu temperatura 373–453 K (100–180°C). Monohidratne forme (bemit i dijaspor) se rastvaraju na sledećim opsezima temperatura: 403–453 K (130–180°C) i 473–523 K (200–250°C), respektivno (Songqing et al., 2002; Pereira et al., 2009; Đurić et al., 2010a).

Osnovni izvor gubitka aluminijuma i natrijum hidroksida, tokom Bayer-ovog procesa, je natrijum alumosilikat koji se taloži u tzv. „crvenom mulju“. Istaloženi crveni mulj, dobijen na

ovaj način, takođe predstavlja i ekološki problem, jer se može samo delimično reciklirati (Panias et al., 2001). Najveći deo se odlaže na jalovištu. U današnje vreme ovaj problem privlači dosta pažnje, posebno zbog globalnih problema zaštite životne stedine usled industrijskih procesa, koji zahtevaju primenu globalnih trendova tokom lokalnog delovanja.

Na osnovu dostupnih referenci, najznačajniji parametri procesa, koji utiču na nivo izdvajanja Al_2O_3 tokom luženja su: minerloški i hemijski sastav boksita, distribucija veličine zrna šarže, koncentracija Al_2O_3 u polaznom rastvoru i njegov sadržaj Na_2O , temperatura procesa luženja, brzina mešanja i trajanje procesa luženja (Gontijo et al., 2009; Pereira et al., 2009; Cao et al., 2009).

Obzirom da je pod uticajem velikog broja različitih ulaznih parametara, proces luženja boksita pod industrijskim uslovima Bayer-ove tehnologije, je izuzetno kompleksan. Mogućnost predviđanja izdvajanja Al_2O_3 tokom luženja, zasnovan na strukturi ulaznih parametara procesa, predstavlja veliki izazov za upravljanje samim procesom (Chelgani i Jorjani, 2009).

Zasnovano na tim činjenicama, osnovni cilj istraživanja postavljen u radu (Mihajlović et al., 2014a) bio je da se definiše matematički model za predviđanje nivoa izdvajanja Al_2O_3 (ishod procesa), tokom luženja bemitnog boksita, kao funkcija ulaznih parametara samog procesa. Dobijeni model predstavlja veliku prednost u optimizaciji procesa, jer može dovoljno tačno da predviti ishod istraživanog procesa, i kao takav je od velikog praktičnog značaja.

Baza polaznih podataka, korišćena za proračune i modelovanje, formirana je na osnovu podataka sakupljenih tokom industrijske proizvodnje u fabriци glinice Birač, Zvornik (Bosna i Hercegovina). Značajni parametri procesa, uključeni u polaznoj bazi podataka bili su: hemijski sastav boksita (osnovni konstituenti koji uključuju Al_2O_3 , SiO_2 i Fe_2O_3); sastav polaznog aluminatnog rastvora (uključujući Al_2O_3 i Na_2O) i sadržaj Al_2O_3 u aluminatnom rastvoru na kraju procesa luženja, koji je zapravo glavni cilj procedure modelovanja. Svi značajni parametri procesa su mereni na dnevnom nivou, tokom 2011. godine, i na taj način je sakupljeno 330 linija podataka. Merenje parametara je vršeno samo tokom redovnog stanja proizvodne linije. Tokom dana u kojima se, zbog različitih razloga, proces zaustavlja ili prekida, merenja nisu vršena.

Hemijski sastav polaznih boksita je ispitivan upotrebom absorpcionog spektrofotometra Perkin Elmer 4000 i UV/VIS spektrofotometra LAMBDA 15. Aluminatni rastvor koji je korišćen u procesu luženja je povratni industrijski rastvor, koji se koristi u svakodnevnoj proizvodnoj praksi fabrike glinice Birač (BiH). Polazna koncentracija aluminijuma u rastvoru je određivana povratnom titracijom rastvorom cink nitrida (kompleksometrijska titracija) uz ksilanol oranž kao indikator.

Izlaz istraživanog procesa je izluženje Al_2O_3 koje će biti predstavljeno kao Y u narednom tekstu, i odnosi se na izdvajanje aluminijuma iz boksita u procesu luženja, pri čemu se izračunava sledećim obrascem:

$$Y_{(\text{Al}_2\text{O}_3 \text{ izluženje})} = \frac{(1 - \text{Al}_2\text{O}_3(r.m.) \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3(b))}{\text{Al}_2\text{O}_3(b) \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3(r.m.)} \cdot 100 (\%) \quad (5.1)$$

Gde su:

$\text{Al}_2\text{O}_3(b)$; $\text{Fe}_2\text{O}_3(b)$ – sadržaj u boksu (%)

$\text{Al}_2\text{O}_3(r.m.)$; $\text{Fe}_2\text{O}_3(r.m.)$ – sadržaj u preostalom mulju u autoklavu (crveni mulj) (%).

Na osnovu materijalnog bilansa Bayer-ovog procesa, polazna količina Al_2O_3 iz boksita, se deli između aluminatnog rastvora i autoklavnog mulja (crvenog mulja). Na taj način, koncentracija Al_2O_3 u finalnom aluminatnom rastvoru, na kraju procesa luženja, može se izračunati jednačinom (5.1). Primenom jednačine (5.1) može se dobiti tačnost proračuna iznad 99%.

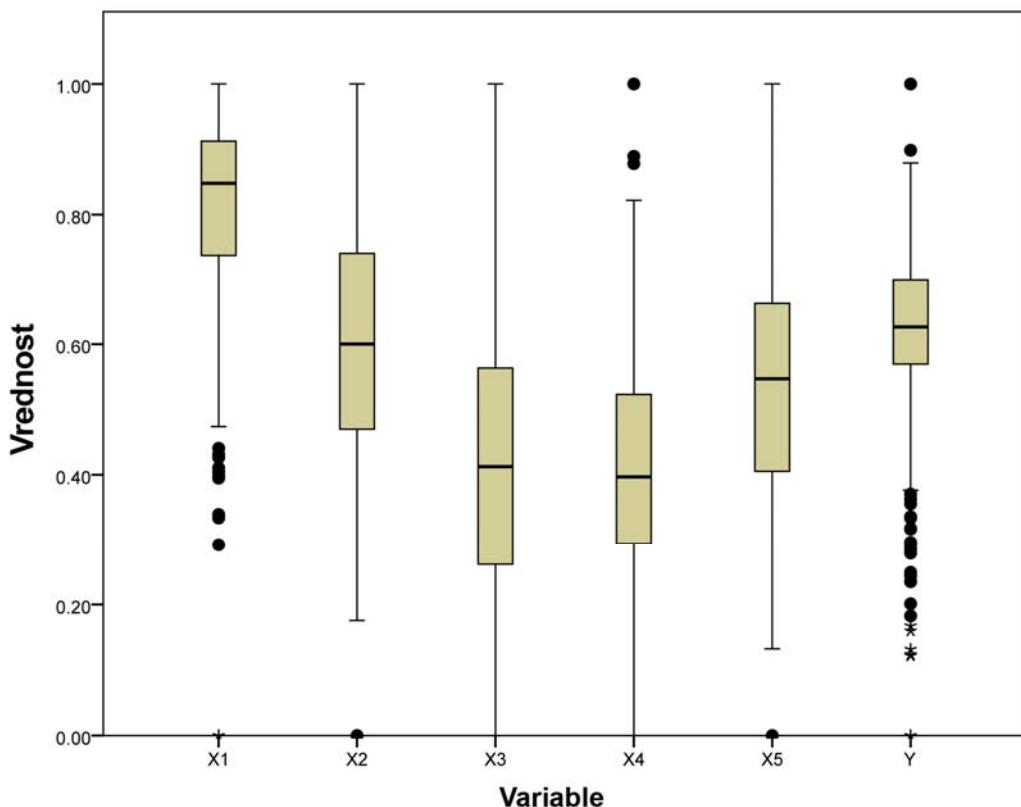
Kao uticajni ulazni parametri, uključeni u proceduru statističkog modelovanja, odabrani su sledeći faktori procesa:

- X_1 – koncentracija Na_2O u polaznom rastvoru (g/dm^3),
- X_2 – koncentracija Al_2O_3 u polaznom rastvoru (g/dm^3),
- X_3 – koncentracija Al_2O_3 u boksu (%),
- X_4 – koncentracija SiO_2 u boksu (%),
- X_5 – koncentracija Fe_2O_3 u boksu (%).

Bemitni boksit, koji se koristi za proizvodnju glinice u ovoj fabrici, je iz rudnog tela Vlasenica (Bosna i Hercegovina). Temperatura procesa luženja se održavala konstantnom na 518K (245°C). Pritisak u autoklavu je bio 35 bar. Krupnoća zrna boksita je bila 100% – 74 μm , koja je dobijena nakon klasifikacije hidrociklonom. Odnos čvrsto:tečno u šarži autoklava je bio Č:T = 1:5. Koncentracija čvrste faze je bila 160–200 g/dm^3 , zavisno od koncentracije Na_2O u polaznom aluminatnom rastvoru. Brzina mehaničkog mešanja je bila 31 min^{-1} .

Kako je već navedeno u prethodnom tekstu, za modelovanje procesa luženja boksita, podaci su sakupljeni merenjem značajnih ulaznih veličina procesa (X_1 – X_5) kao i izlazne veličine (Y). Usled različite prirode i opsega vrednosti ovih veličina, sve linije podataka su standardizovane i ispitivane su potencijalne pogrešne observacije („outliers“), pre samog procesa modelovanja. U nekim slučajevima je uočeno jako ekstremno ponašanje pojedinih varijabli (Slika 5.1). Ove varijable su uklonjene iz polazne baze podataka i na taj način je preostalo 299 linija podataka u finalnoj bazi.

Originalne, nestandardizovane vrednosti ulaznih parametara tehnološkog procesa ($X_1 - X_5$), kao i indikator kvaliteta procesa – izlaz procesa (Y), u formi deskriptivne statistike – su predstavljeni u tabeli 5.1. Deskriptivana statistika je urađena za 299 linija podataka, koje su preostale nakon uklanjanja ekstrema, koji su i korišćeni u procesu izrade modela procesa.



Slika 5.1. Identifikacija pogrešnih opservacija („outliers“) standardizovanih varijabli modela

Može se uočiti da varijable X_3 , X_4 i X_5 , imaju malu varijansu (Tabela 5.1). Ipak, ove varijable su veoma značajne za istraživani tehnološki process, posebno X_3 . Varijabla X_3 predstavlja sadržaj Al_2O_3 u polaznom boksu i predstavlja jedan od najznačajnijih parametara Bayer-ovog procesa, te samim time nemože da se izostavi iz dalje analize.

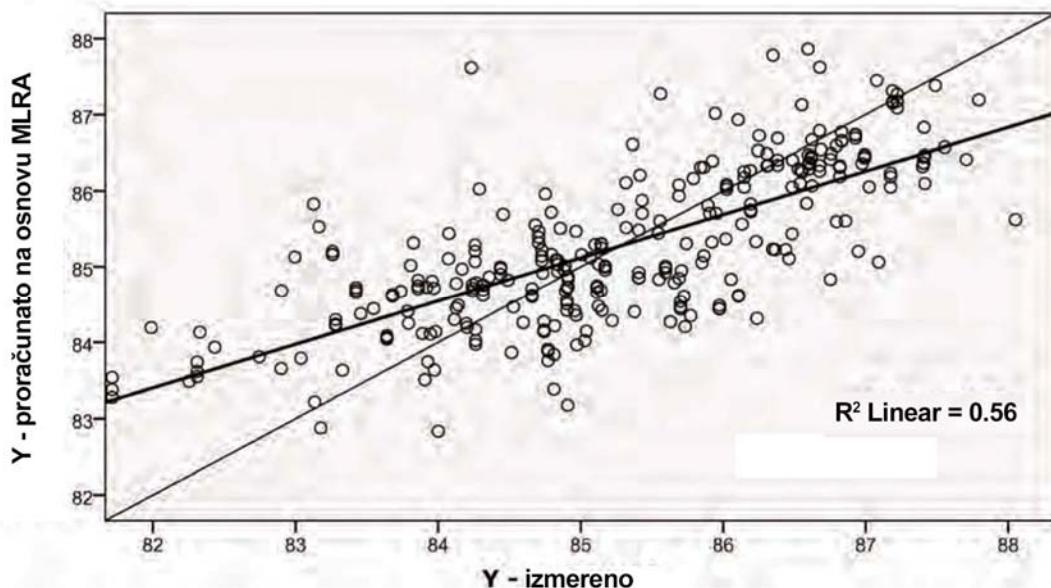
Procedura modelovanja navedenog sistema, urađena je prateći logiku ASAMA algoritma za selekciju najadekvatnijeg načina modelovanja na osnovu strukture ulaznih podataka sistema (datog na slici 4.34). Samim time, analizirano je više mogućnosti modelovanja navedenog procesa u užem vremenskom periodu.

Tabela 5.1. Deskriptivna statistika ulaznih (X_i) i izlaznih (Y) Parametara procesa luženja boksita uključujući 299 linija podataka

	Opseg	Minimum	Maksimum	Srednja vr.		Std. Devijacija	Varijansa
				Statistička	Std. Error		
X_1	90.23	129.63	219.86	2.040E2	0.4050	10.398	108.131
X_2	48	81	129	109.79	0.329	8.442	71.274
X_3	4.58	50.08	54.66	51.975	0.034	0.866	0.750
X_4	3.54	4.88	8.42	6.3208	0.022	0.562	0.316
X_5	4.39	22.42	26.81	24.833	0.031	0.803	0.645
Y	13.077	76.293	89.370	84.427	0.06574	1.687	2.848

Naime, u prethodnom istraživanju je izvršen pokušaj da se razvije numerički model za proračun izluženja Al_2O_3 , zasnovano na skupu diferencijalnih jednačina. Rezultati modelovanja ovog tipa, predstavljeni su u radu (Đurić et al., 2010a). Kako je već navedeno u prethodnom tekstu, ovaj način modelovanja spada u klasu tzv. modelovanja po principu “bele kutije” (Wernick i Lehman, 1999; Davoody et al., 2012). Iako je dobijen dosta precizan model, koji je rezultovao sa tačnošću predviđanja od 98%, sama procedura razvoja modela bila je suviše kompleksna. Takođe, da bi se dobijena jednačina modela primenila u izmenjenim uslovima realne proizvodne, neophodne su dodatne modifikacije jednačine modela.

Potom je izvršen pokušaj da se isti sistem modeluje metodama linearne statističke analize, upotrebom MLRA metoda. Rezultati modelovanja procesa luženja boksita MLRA metodologijom su predstavljeni u radu (Đurić et al., 2010c). Primenom klasičnog “Forced – entry” MLRA metoda na razmatranom sistemu dobijena je jednačina modela sa niskom tačnošću predviđanja ($R^2 = 0.56$). Rezultati predviđanja stepena izluženja Al_2O_3 , modelom MLRA, upoređeni sa stvarno izmerenim rezultatima su dati na slici 5.2.



Slika 5.2. Rezultati predviđanja izluženja Al_2O_3 na osnovu modela višestruke linearne regresione analize (Đurić et al., 2010c).

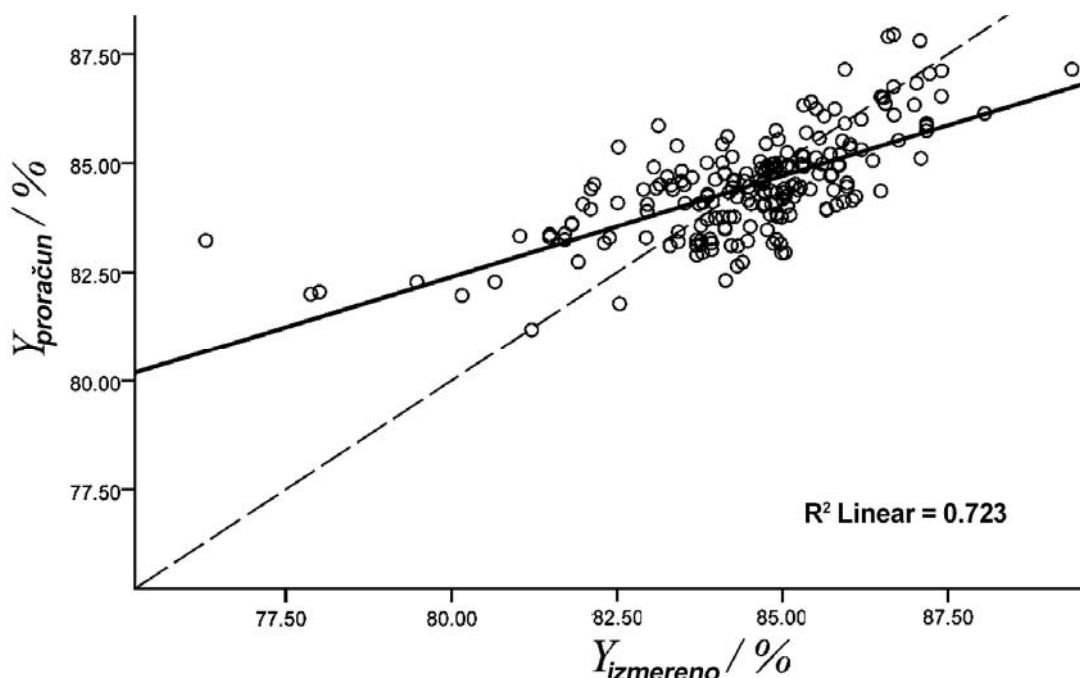
Takođe, dobijeni MLRA model je imao i problem kolinearnosti. To je dokazano na osnovu procedure opisane u razvoju u ASAMA algoritmu koja je data na slici 4.20. Dobijene vrednosti VIF faktora razmatranog MLRA metoda, za više varijabila su imale vrednosti iznad 2, što ukazuje na povećanu kolinearnost određenih prediktora. Takođe i vrednosti statističke značajnosti većine prediktora bile su iznad $p>0.05$. Samim time, modelovanje metodom linearne statistike zasnovane na MLRA principu ne može se smatrati dovoljno pouzdanim u ovom slučaju. Pored toga, odnos Regresion : Residual vrednosti ANOVA testa dobijenog MLRA modela nisu bile povoljne (Tabela 5.2.)

Tabela 5.2. Rezultati ANOVA testa razmatranog MLRA modela predviđanja

Model	Suma kvadrata (Sum of Squares)	Stepen slobode (df)	Srednja kvadratna vrednost (Mean Square)	F	Značajnost (Sig.)
Regresija (Regress.)	708.744	11	64.431	50.511	0.000 ^a
Ostatak (Residual)	568.913	446	1.276		
Ukupno (Total)	1277.657	457			

Potom je izvršen dalji pokušaj da se isti sistem modeluje primenom nelinearne statističke analize uz ulazne promjenjive u okviru jednog intervala. Samim time, primenjeno je modelovanje preko veštačkih neuronskih mreža ANN. Rezultati ANN analize procesa luženja Al_2O_3 iz boksita, u okviru Bayer-ove tehnologije, prikazani su u radu (Đurić et al., 2012).

U tu svrhu formirana je ANN arhitektura razmatranog procesa. Dobijen je model sa nešto većom tačnošću predviđanja, u poređenju sa MLRA modelom. Naime, tačnost predviđanja ANN modela bila je $R^2 = 0.723$ (Đurić et al., 2012). Upoređenje vrednosti izluženja Al_2O_3 , dobijenih predviđanjem ANN modela i stvarno izmerenih vrednosti, predstavljeno je na slici 5.3.



Slika 5.3. Izluženje Al_2O_3 predviđeno modelom ANN upoređeno sa izmerenim izluženjem Al_2O_3 (Đurić et al., 2012)

Iako tačnost predviđanja od 72.3% deluje dosta visoka, ipak je procenjeno da model ovakve tačnosti ne može imati adekvatnu primenjivost u indutrijskoj praksi. Osnovni nedostatak modela zasnovanog na ANN, razvijenog upotreboom SPSS softvera (PASW Statistics) je u činjenici da se zasniva na samo jednom pravilu koje opisuje ponašanje ulaznih promjenjivih. Na taj način, javljaju se poteškoće kod upotrebe istog modela na validaciji novog seta ulaznih parametara, dobijenih merenjem na istom procesu u narednim segmentima vremena (Mihajlović et al., 2011).

Iz navedenih razloga, kao što i procedura ASAMA algoritma sugerise (Slika 4.34) odlučeno je da se razvije matematički model zasnovan na nelinearnoj statističkoj analizi koja uzima u obzir više od jednog opsega promene ulaznih veličina sistema. Kao alat daljeg modelovanja razmatranog sistema primenjena je metodologija fazi sistema zaključivanja sa adaptivnom mrežom “Adaptive Network Based Fuzzy Inference System (ANFIS),.. ANFIS metodologija se zasniva na više od jednog pravila za opisivanje ponašanja ulaznih varijabli, što će biti opisano u daljem tekstu.

Uzveši u obzir da ANFIS procedura može alocirati vrednosti svake od ulaznih veličina u više od jedne skale, adekvatna je za modelovanje seta ulaznih promenjivih širokog opsega, kakve su varijable X₁, X₂ ali i sama izlazna veličina Y (Tabela 5.1.). Primeri primene ANFIS procedure u modelovanju različitih kompleksnih tehnoloških procesa su prisutni u brojnim referencama novijeg datuma (Yetilmezsoy, 2011; Canete et al., 2013; Chauhan et al., 2013).

Suština velike primenjivosti ANFIS metodologije leži u činjenici da ANFIS sistem služi kao osnova za konstrukciju seta fazi (fuzzy) “if-then” pravila uz adekvatne pristupne funkcije (membership functions) koje generišu uslovne ulaz-izlaz parove. ANFIS struktura se dobija ugradnjom fazi sistema zaključivanja u osnovu adaptivnih mreža. Adaptivna mreža je mrežna struktura koja se sastoji od većeg broja čvorova povezanih usmerenim vezama. Izlazi ovakvih adaptivnih čvorova zavise od parametara podložnih modifikacijama koji se odnose na ove čvorove. Pravilo učenja određuje kako će se ovi parametri varirati kroz iteracije da bi se minimizirala finalna greška. U klasu adaptivnih mreža spadaju i veštačke neuronske mreže opisane u prethodnom poglavljju. Samim time ANFIS struktura se može posmatrati izvesnom nadogradnjom ANN strukture. S druge strane, prema Takagi i Sugano-u (1985) fazi system zaključivanja (fuzzy inference system – FIS) je osnova zasnovana na teoriji fazi logike i fazi if-then pravila. Tri osnovne komponente FIS structure su: baza pravila, baza podataka i mehanizam rezonovanja. Baza pravila se sastoji od adekvatnog broja if-then pravila za različite nivoje opsega ulaznih promenjivih. Na primer, pravilo može biti: “Ukoliko je koncentracija SiO₂ u polaznom uzorku boksita *niska*, tada je nivo izluženja Al₂O₃ *visok*”, gde su *niska* i *visok* upravo lingvističke promenjive if-then pravila. Baza podataka definiše pristupne funkcije primenjene kod fazi pravila dok mehanizam rezonovanja izvršava proceduru zaključivanja (Jang et al., 1997; Savić et al., 2013).

Na taj način za, na primer, dve ulazne promenjive (varijable X₁ i X₂), i uz pretpostavku da se njihovi opsezi mogu podeliti u dva nivoa (opsega), postojaće baza pravila koja sadrži dva pravila za modelovanje vrednosti izlazne promenjive Y:

Pravilo 1: Ukoliko je X₁ u opsegu A₁ i X₂ je u opsegu B₁, tada f₁ = p₁x₁ + q₁x₂ + r₁

Pravilo 2: Ukoliko je X₁ u opsegu A₂ i X₂ u opsegu B₂, tada f₂ = p₂x₁ + q₂x₂ + r₂

U slučaju da je $f(X_1, X_2)$ polinom prvog reda, tada se model naziva Sugano fazi model prvog reda (Takagi i Sugano, 1985).

Grafičko predstavljanje opšteg oblika ANFIS mreže je dano na slici 5.4. Kao što se može videti sa slike 5.4, ANFIS arhitektura se može predstaviti sa pet slojeva. Vrednosti X_1 i X_2 su ulazi čvorova u sloju 1; A_i i B_i su lingvistička obeležja opsega ulaznih veličina (malo, veliko, ...) koje se vezuju za funkciju samih čvorova. Pristupne funkcije čvorova lociranih u sloju 1 ($O_i^1 = \mu A_i(X_i)$ ili $O_i^2 = \mu B_i(X_i)$) definišu nivo do kojeg data vrednost X_i zadovoljava kriterijum kvantifikacije A_i , B_i , itd. Pristupne funkcije su obično zvono funkcije sa maksimumom jednakim 1 i minimumom jednalim 0, odnosno Gauss-ove funkcije.

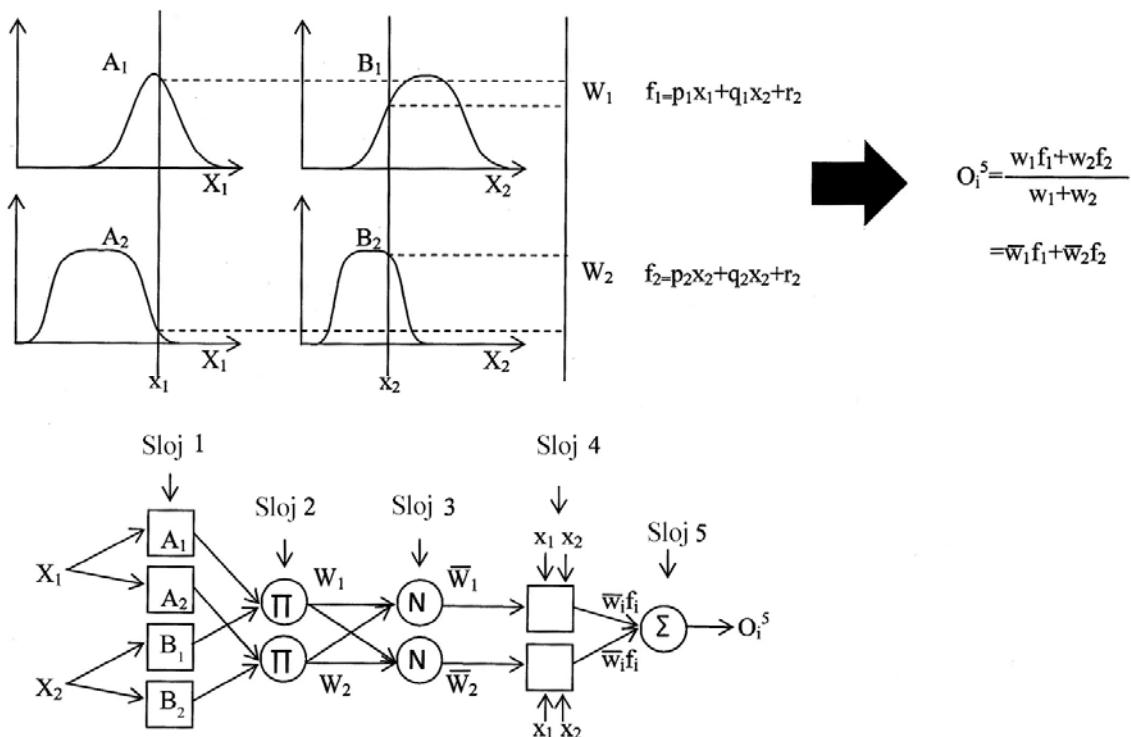
Čvorovi locirani u sloju 2 su množioci (multipliers), koji umnožavaju signale koji izlaze iz čvorova sloja 1. Npr. $O_i^2 = W_i = \mu A_i(X_i) \times \mu B_i(X_i)$, $i = 1, 2$, itd. Izlaz svakog čvora predstavlja snagu samog pravila. Tako da i -ti čvor sloja 3 izračunava nivo snage i -tog pravila u odnosu na sumu snaga svih pravila. Na taj način $O_i^3 = \bar{W}_i = W_i / (W_1 + W_2 + \dots)$, $i = 1, 2, \dots$

Svaki čvor i u sloju 4 ima funkciju sledećeg tipa: $O_i^4 = \bar{W}_i \cdot f_i = \bar{W}_i \cdot (p_i x_1 + q_i x_2 + r_i)$, gde će se p_i , q_i i r_i posmatrati kao konsekventni parametri. Jedan jedini čvor u sloju 5 je čvor koji izračunava ukupni izlaz kao sumu svih dolaznih signala, odnoco: $O_i^5 = \sum_i \bar{W}_i f_i = \frac{\sum_i W_i f_i}{\sum_i W_i}$.

Trening parametara ANFIS strukture se ostvaruje prema hibridnom algoritmu pravila za učenje koji je integracija gradijentnog diskontnog metoda i metoda najmanjeg kvadrata. U prolasku unapred kroz algoritam, funkcionalni signali se kreću sve do sloja 4 i konsekventni parametri su identifikovani metodom najmanjeg kvadrata, kako bi se minimizirala greška merenja. U povratnom prolazu (back-propagation), parametri premise se modifikuju putem gradijentnog diskontnog metoda (Jang et al., 1997).

Da bi se primenila ANFIS metodologija, na proces luženja boksita, skup od 299 ulaznih i izlaznih linija podataka u bazi podataka je podeljen u dve grupe. Prva grupa se sastojala od 214 ($\approx 70\%$) slučajno odabranih uzoraka, i korišćena je za trening modela; dok se druga grupa sastojala od 85 ($\approx 30\%$) preostalih uzoraka iz baze podataka i korišćena je za testiranje modela. Selekcija varijabli za ove dve grupe je učinjena primenom generatora slučajnih brojeva na Bernoulli-ovo raspodeli (Bernoulli, 1690; Mihajlović et al., 2014).

Takođe, kako je već rečeno, u obradi podataka pre početka trening i testing stadijuma, vrednosti svake od varijabli su standardizovane u odnosu na maksimalnu vrednost. Ovo je učinjeno zbog različite prirode i mernih jedinica ulaznih i izlaznih veličina.

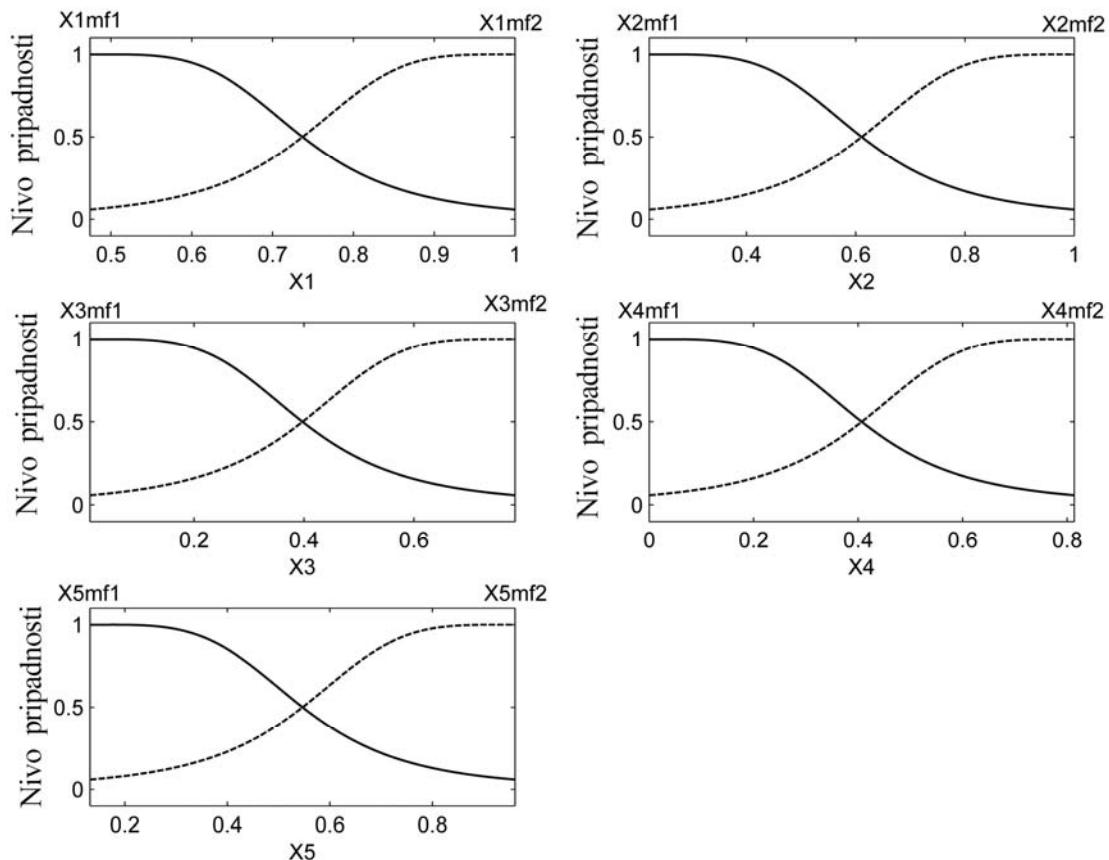


Slika 5.4. Grafička reprezentacija ANFIS strukture (Mihajlović et al., 2014)

Na osnovu trendova i opsega vremenskih serija ulaznih veličina, predstavljenih u Tabeli 5.1., odlučeno je da treba da se primeni ANFIS mreža sa dva pravila. Odabrana pristupna funkcija je bila Gauss-ova. Izgled pristupne funkcije za svih 5 ulaznih promenjivih je dat na slici 5.5.

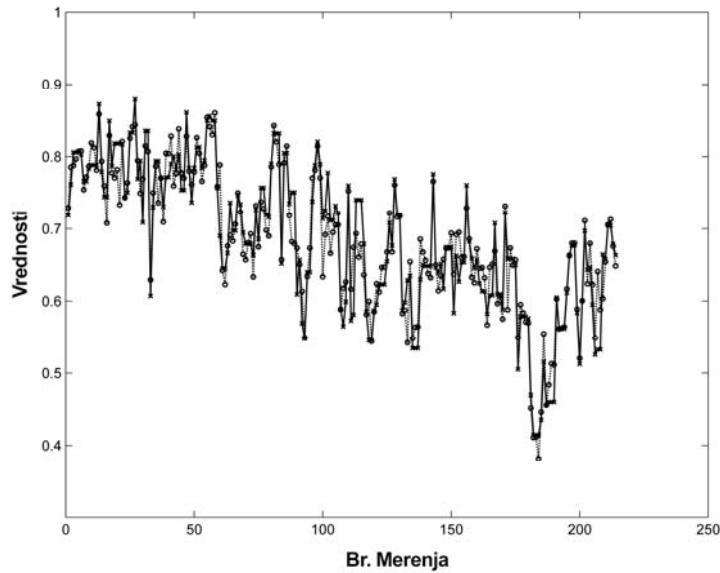
Tokom faze treninga vršana je korekcija težinskih parametara (p_i, q_i, r_i , itd) veza, predstavljenih na slici 5.4., tokom neophodnog broja iteracija, sve dok se srednja kvadratna greška (RMSE) između proračunatog i izmerenog izlaza ANFIS mreže nije svela na minimum. Tokom druge faze (faza testiranja), ostalih 30% podataka je korišćeno. U ovoj fazi mreža koristi težinske parametre određene tokom prve faze. Ovi novi podaci, koji nisu korišćeni u treningu mreže, sada se uvode kao nove vrednosti ulaznih promenjivih (X_i) i potom se transformišu do novih izlaznih promenjivih (Y). Za proračune predstavljene u ovom radu, morišćen je MATLAB ANFIS editor (MathWorks V.7.1., 2007). U slučaju istraživanja nivoa izluženja Al_2O_3 u okviru Bayer-ovog

procesa, neophodan broj iteracija do postizanja minimuma odstupanja između izmerenog izlaza i vrednosti proračunatih modelom, bio je 10.



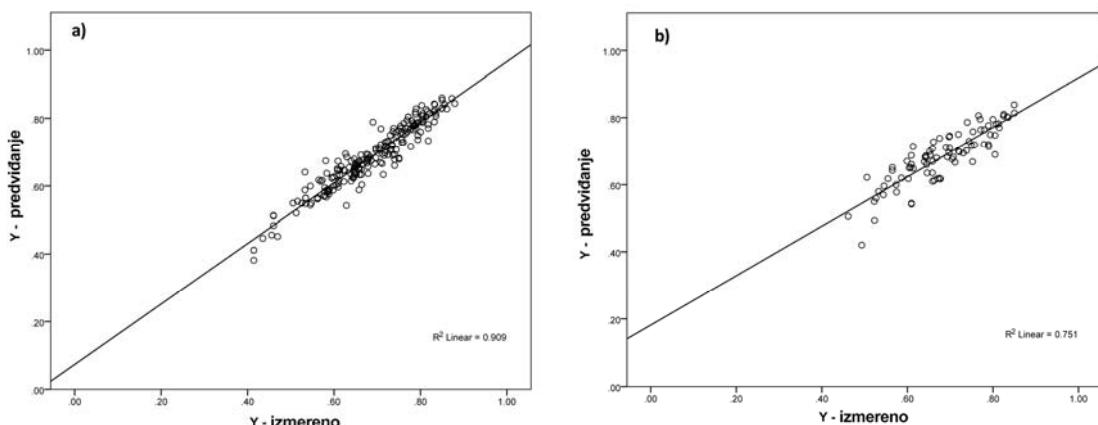
Slika 5.5. Pristupne funkcije ulaznih promenljivih (X_1 do X_5)

Dobijene vrednosti konačnog ANFIS modela mogu se proceniti i poređenjem sa izmerenim vrednostima. Poređenje između izmerenih i ANFIS modelom predviđenih vrednosti izluženja Al_2O_3 (Y) tokom faze treninga, predstavljeni su na slici 5.6.



Slika 5.6. Vremenske serije izmerenih (-x-) i ANFIS modelom predviđenih (-o-) vrednosti Al_2O_3 dobijenih tokom faze treninga

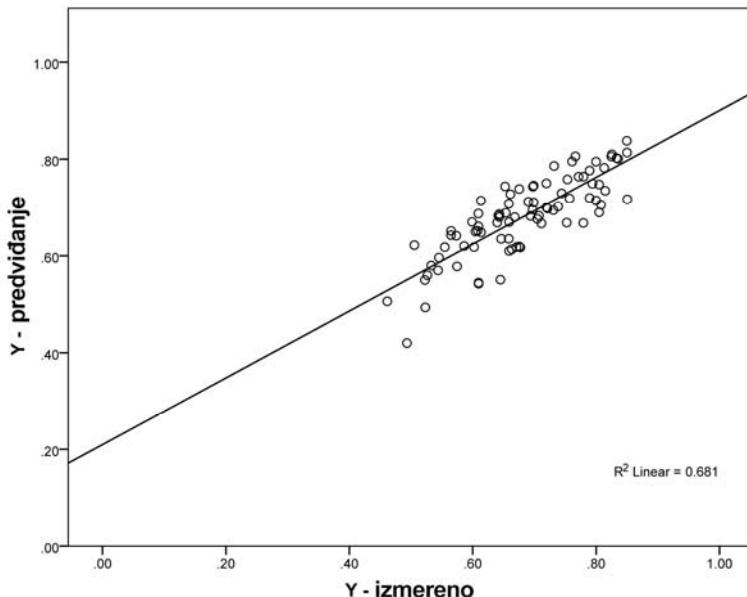
Finalna prihvatljivost dobijenog ANFIS modela može se proceniti na osnovu vrednosti koeficijenta determinacije (R^2) između izmerenih i modelom predviđenih vrednosti izluženja Al_2O_3 (Y), u trening fazi i fazi testiranja. Vrednosti R^2 su predstavljene na slici 5.7. a i b, za trening i testing fazu, respektivno.



Slika 5.7. Izluženje predviđeno ANFIS modelom upoređeno sa stvarnim izluženjem Al_2O_3 za (a) trening i (b) fazu testiranja

Na osnovu vrednosti datih na slici 5.7., može se zaključiti da je ANFIS pristup modelovanju, predvideo izluženje Al_2O_3 sa koeficijentom determinacije $R^2 = 0.909$ (slika 5.7.a) i $R^2 = 0.751$ (slika 5.7.b), u trening i testing stadijumu – respektivno, što predstavlja veoma veliku značajnost. Ovo znači da se izdvajanje Al_2O_3 može predvideti sa tačnošću iznad 75%, zasnovano na poznatom setu vrednosti ulaznih veličina procesa (X_1 do X_5), upotrebom ANFIS modela opisanog u ovom radu. Naravno, vrednost tačnosti predviđanja ovog modela nije značajno uvećana u odnosu na ANN model opisan u prethodnom tekstu (gde je R^2 imala vrednost 0.723). Ipak, ANFIS model ima značajno veću fleksibilnost u odnosu na ANN model jer je podložan široj varijaciji ulaznih veličina u dva opsega vrednosti i samim time značajno primenjiviji u praksi.

Ova tvrdnja je dodatno dokazana validacijom ANFIS modela potpuno novim setom podataka sakupljenim tokom 2012. godine. U tu svrhu sakupljeno je dodatnih 85 linija podataka sa iste proizvodne linije, tokom perioda Januar-Mart 2012. Set je imao isti broj linija podataka kao i set koji je korišćen za testiranje ANFIS modela. Uz ove nove podatke ANFIS model je dao odgovor sa očekivano visokom tačnošću, rezultujući koeficijentom determinacije od $R^2 = 0.681$ (Slika 5.8). Isti set podataka je primenjen i na pokušaj validacije ANN modela, ali je dobijena izuzetno niža vrednost R^2 .



Slika 5.8. Izluženje predviđeno ANFIS modelom upoređeno sa stvarno izmerenim izluženjem Al_2O_3 u fazi validacije

6. ZAKLJUČNA RAZMATRANJA

U ovoj disertaciji su predstavljeni primeri različitih pristupa modelovanju primenjenih u modelovanju realnih tehnoloških sistema. Svi primeri u disertaciji su rezultat višegodišnjeg istraživanja u oblasti modelovanja kompleksnih tehnoloških procesa.

Svi aspekti modelovanja predstavljeni na realnim sistemima dodatno su upoređivani sa raspoloživim referencama drugih autora. Takođe, predstavljena su savremena teorijska saznanja o klasifikaciji matematičkih modela i savremeni trendovi naučne primene modela u praksi.

Predstavljeni primeri modelovanja raznovrsnih tehnoloških procesa su poslužili za definisanje novog algoritma za selekciju najadekvatnijeg načina modelovanja zasnovanog na strukturi polaznih podataka sistema. Dobijeni algoritam ima akronim ASAMA (Algorithm for Selection of Adequate Modeling Approach).

Kao primeri koji su korišćeni u ovom radu predstavljeni su sledeći tehnološki sistemi:

Model procesa degazacije rastopa čelika koji je definisan primenom pristupa M1 (modelovanje sistemom diferencijalnih jednačina) - modelovanje po principu "bele kutije".

Kao prvi primer modelovanja po principu "crne kutije" dat je slučaj određivanja optimalnih uslova za izdvajanje bakra iz jalovinskog materijala deponovanog nakon procesa flotacije. Taj matematički model je zasnovan na prethodnom dizajnu eksperimenta (M2.1). Potom, je predstavljeno modelovanje zasnovano na merenju tehnoloških pokazatelja realnih procesa. Kao prvi primer ovakvog vida modelovanja dat je slučaj istraživanje najoptimalnijeg načina uklanjanja arsena iz koncentrata bakra. Za ovaj primer je korišćena metoda modelovanja podataka izmerenih u realnom sistemu zasnovana na korišćenju najoptimalnije od već postojećih jednačina modela (M2.2). Za slučaj kada nije moguće primeniti već postojeću jednačinu modela, i gde se model razvija primenom linearne statističke analize (M2.3.1) uzet je proces razlaganja industrijskog rastvora natrijum aluminata, kao deo Bayer-ovog procesa proizvodnje glinice. Kao primer nelinearne statističke analize uz razvoj modela za samo jedan opseg ulaznih podataka (M2.3.2.1) uzet je primer modelovanja emisija sumpor dioksida (SO_2) u okruženju topionice bakra. Potom, za slučaj nelinearnog modelovanja uz segmentaciju ulaznih veličina u više od jednog opsega (M.2.3.2.2) dat je primer modelovanja procesa luženja boksita u realnim industrijskim uslovima.

U samoj disertaciji je izvršena izvesna segmentacija metoda modelovanja i za svaki pristup je dat teorijski prikaz korišćene metodologije modelovanja premenjene na realnom sistemu.

Ovakav pristup je rezultovao u mogućnosti razvoja ASAMA algoritma koji, donosiocima odluka, može pomoći u selekciji najadekvatnijeg načina modelovanja zasnovano na strukturi podataka koju imaju o sistemu koji je objekat modelovanja.

Primenjivost razvijenog algoritma je potom testirana na konkretnom tehnološkom procesu koji je istovremeno modelovan većim brojem raspoloživih metoda, opisanih u algoritmu, i na taj način je izvršena komparacija dobijenih podataka. U pitanju je bio proces luženja boksita, gde je cilj modelovanja bio dobijanje mogućnosti predviđanja stepena izluženja Al_2O_3 . Prvenstveno su predstavljeni rezultati razvoja modela navedenog sistema zasnovano na pristupu modelovanja „bele kutije“. Potom, dati su rezultati modelovanja istog sistema primenom linearne statističke analize – MLRA. Nakon toga, dati su rezultati modelovanja navedenog sistema primenom nelinearne statističke analize koja se zasniva na jednom opsegu ulaznih promenjivih – ANN. Na kraju, isti sistem je modelovan primenom metodologije koja ulazne podatke klasificuje u više od jednog opsega – ANFIS metoda.

Na taj način bilo je moguće vršiti komparaciju rezultata dobijenih većim brojem metoda modelovanja. Merila za komparaciju bile su veličine koje su uključene u odlučivanje na osnovu ASAMA algoritma

Na osnovu rezultata predstavljenih u ovoj disertaciji, može se zaključiti da ne postoji univerzalni način modelovanja koji je primenjiv, sa dovoljnom tačnošću, na veći broj kompleksnih tehnoloških procesa. Postoji velika različitost tehnika izrade matematičkih modela, koje su dostupne u formi različitih savremenih alata modelovanja. Ipak donosioc odluka mora biti u stanju da odluči koja tehnika modelovanja je najadekvatnija za konkretni sistem koji je objekat istraživanja. Veliki broj indikatora koji se mogu koristiti kao pomoć u donošenju takve odluke je predstavljen u ovoj disertaciji. Sam ASAMA algoritam je i razvijen na osnovu primene tih indikatora na konkretnim slučajevima modelovanja kompleksnih tehničko-tehnoloških sistema i kao takav se može smatrati alatom donošenja odluka u smislu prihvatljivosti tehnika modelovanja na konkretnim sistemima.

Uzveši u obzir polazne hipoteze koje su postavljene kao osnov istraživanja u ovoj disertaciji:

Ho - Moguće je kombinacijom različitih segmenata modelovanja, prisutnih u brojnim kvantitativnim i kvalitativnim metodama, formirati algoritam za selekciju najadekvatnije metode matematičkog modelovanja primenljiv u realnoj praksi.

H1 - Izbor adekvatne metode za modelovanje kompleksnih tehničkih sistema direktno je zavistan od karakteristika sistema.

H2 - Izbor adekvatne metode za modelovanje kompleksnih tehničkih sistema direktno je zavistan od korelacije odnosa ulaznih i izlaznih veličina sistema.

Mogu se izvesti sledeći zaključci.

Ho - Istraživanjem predstavljenim u poglavljima 4 i 5 ove disertacije pokazano je da je moguće kombinacijom različitih segmenata modelovanja, prisutnih u brojnim kvantitativnim i kvalitativnim metodama, formirati algoritam za selekciju najadekvatnije metode matematičkog modelovanja primenljiv u realnoj praksi. Naime, pregled modelovanja različitih realnih sistema, predstavljen u pogлављu 4, rezultovao je definisanjem ASAMA algoritma. Potom je primenjivost algoritma definisana na konkretnom tehničkom sistemu predstavljenom u poglavlu 5.

H1 – Svi sistemi koji su predstavljeni u poglavlu 4 imali su svoje konkretnе osobnosti i karakteristike koje su uslovaljavale različitost metoda za njihovo modelovanje. U određenim slučajevima je pojedina od analiziranih metoda davana odlične rezultate, dok je ista metoda, primenjena na drugom sistemu, davana lošu mogućnost predviđanja modela. Razlog za to je upravo u činjenici da se i sami sistemi koji se modeluju razlikuju po svojim karakteristikama te iziskuju sasvim drugačije načine za izradu modela.

H2 – Upravo međusobne koerlacije i odnosi vrednosti ulaznih i izlaznih veličina sistema rezultuju tačnom ili manje tačnom predikcijom selektovanog modela. To je dokazano u logici ASAMA algoritma predstavljenog u ovoj disertaciji. Međusobna korelacija varijabli sistema, koja indicira priomenjivost određenih tehnika modelovanja merena je i testirana primenom: Pearson-ovih korelacionih koeficijenata, ANOVA testom (F test; odnos „regression to residual“; R²) i analizom kolinearnosti.

Samim time, može se smatrati da su rezultatima predstavljenim u ovoj disertaciji potvrđene tvrdnje sve tri istraživačke hipoteze, postavljenih pri definisanju samog cilja istraživanja.

7. LITERATURA

Abdul-Wahab, S.A., & Al-Alawi, S.M. Assessment and prediction of tropospheric ozone concentration levels using artificial neural networks. *Environmental Modelling & Software*, 17 (2002) 219-228.

Al-Alawi, S.M., Abdul-Wahab, S.A., & Balhait, C.S. Combining principal component regression and artificial networks for more accurate predictions of ground – level ozone. *Environmental Modelling & Software*, 23(2008) 396-403.

Aldrich, C., Van Deventer, J.S.J., Reuter, M.A. The application of neural nets in the metallurgical industry. *Minerals Engineering*, 7(5/6) (1994) 793 – 809.

Antonijević, M.M., Dimitrijević, M.D., Stevanović, Z.O., Šerbula, S.M., Bogdanovic, G.D. *J. Hazard. Mater.*, 158 (1) (2008) 23.

Avalle, M., Priarone, P.C., Scattina, A., Experimental and numerical characterization of a mechanical expansion process for thin-walled tubes. *Journal of Materials Processing Technology*, 214 (5) (2014) 1143–1152.

Batchelor, G. K. (1967) *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge, UK: Cambridge University Press.

Benvenuti, M., Mascaro, I., Corsini, F., Lattanzi, P., Parrini, P., Tanelli, G. *Environ. Geol.*, 30 (3) (1997) 238.

Bernoulli, J. (1690). *Quæstiones nonnullæ de usuris, cum solutione problematis de sorte alearum, propositi in Ephem.* University of Basel.

Bertocchi, A.F., Ghiani, M., Peretti, R., Zucca, A. *J. Hazard. Mater.*, 134 (1–3) (2006) 112.

Blagojevic, I., Blečić, D. and Vasiljević, R., *J. Crystal Growth*, 200(1999) 558–64.

Bridewell, W., Sanchez, J.N., Langley, P., Billman, D., An interactive environment for the modeling and discovery of scientific knowledge, *Int. J. Human-Computer Studies*, 64 (2006) 1099–1114.

Bryan, C.G., Hallberg, K.B., Johnson, D.B., Hydrometallurgy, 2009, 83 (1–4), 184.

Brown, C. (2007). Differential Equations - A Modeling Approach. Thousand Oaks, USA: Sage Publications.

De la Calle, A., Bonilla, J., Roca, L., Palenzuela, P., Dynamic modeling and performance of the first cell of a multi-effect distillation plant, Applied Thermal Engineering, 70(1)(2014)410-420.

Canete, J.F., Garcia-Cerezo, A., Garcia-Moral, I., Del Saz, P. & Ochoa, E. Object-oriented approach applied to ANFIS modeling and control of a destillation column. Expert Syst. Appl. 40(14) (2013) 5648–5660.

Cao, S., Zhang, Y.F. & Zhang, Y. Preparation of sodium aluminate from the leach liquor of diasporic bauxite in concentration NaOH solution. Hydrometall. 98 (2009) 298–303.

Chen, G.H. , Chen, Q.Y. , Yin, Z.L. and Yin, Z.M., Trans. Nonferr. Met. Soc. China, 16 (2006) 483–87.

Chauhan, S., Singh, M. & Meena, V.K. Comparative study of BOF steelmaking process based on ANFIS and GRNN model. *IJEIT*. 2(9) (2013) 198–202. Retrieved November 15, 2013, from http://ijeit.com/vol%202/Issue%209/IJEIT1412201303_36.pdf

Chelgani, S.C. & Jorjani, E. Artificial neural network prediction of Al_2O_3 leaching recovery in the Bayer process – Jajarm alumina plant (Iran). Hydrometall. 97 (2009) 105–110.

Cheng, K. A. Teaching mathematical modelling in Singapore schools, The Mathematics Educator, 6(1) (2001) 62-74.

Chernogorova, T.P., Vabishchevich, P.N. Numerical investigation of solidification processes of cylindrical ingots in a metal mould at variable technological circumstances, International Journal of Heat and Mass Transfer, 42 (17) (1999) 3351–3359.

Chouai, A., Cabassud, M., Lann, M.M.Le, Gourdon, C., Casamatta, G. Use of neural networks for liquid-liquid extraction column modelling : an experimental study, Chemical Engineering and Processing 39 (2000) 171-180.

Chung-Ming, K., (2005). Artificial Neural Networks, Institute of Economics, Academia Sinica, Taiwan.

Ciccu, R., Ghiani, M., Serci, A., Fadda, S., Peretti, R., Zucca, A., Miner. Eng., 16 (3) (2003) 187.

Cilek, E.C. Application of neural networks to predict locked cycle flotation test results, Minerals Engineering. 15 (2002) 1095-1104.

Clapeyron, E (1834). "Mémoire sur la puissance motrice de la chaleur". Journal de l'École Polytechnique XIV: 153–90.(French) Facsimile at the Bibliothèque nationale de France (pp. 153–90).

Çoruh, S., Ergun O.N., J. Environ. Manage., 81 (4)(2006) 333.

Çoruh, S., Environ. Prog. Sustain. Energy, 2011.

Cureli, L., Ghiani, M., Surracco, M., Orru, G. Beneficiation of gold bearing enargite ore by flotation and As leaching with Na-hypochlorite. Minerals Engineering 18 (8) (2005) 849–854.

Cybenko, G. Approximations by superpositions of a sigmoidal function, Math. Control Signal Systems, 2 (1989) 303-314.

D'Auria, L. (1879). Remarks on the general theory of the centrifugal governor for steam engines. Journal of the Franklin Institute, 107, 387-388. Based on article: On the Centrifugal Governor. Journal of the Franklin Institute, 83 (6) (1867) 421-423.

Dash, B., Tripathy, B.C. , Bhattacharya, I.N., Das, S.C., Mishra, C.R. and Pani, B.S., Hydrometallurgy, 88(2007) 121–26.

Dash, B., Tripathy, B.C. , Bhattacharya, I.N., Das, S.C., Mishra, C.R. and Mishra, B.K., Hydrometallurgy, 95 (2009) 297–301.

Davoody, M., Zahedi, G., Biglari, M., Meireles, M.A.A. & Bahadori, A. Expert and gray box modeling of high pressure liquid carbon dioxide extraction of Pimpinella anisum L. seed. J. Supercritical Fluids., 72 (2012) 213–222.

Demuth, H., Beale M. (2002). Neural Network Toolbox for use with MATLAB, Handbook, MathWorks Inc., Natick, MA, USA, p. 238

Devasia, S., Nonlinear inversion-based output tracking, IEE Transaction on Automatic Control, 41 (7) (1996) 930 – 942.

Dimitrijević, M., Kostov, A., Tasić, V., Milosević, N., J. Hazard. Mater., 164 (2009) (2–3) 892.

Dreyfus, G. (Edd.) (2004) Neural Networks, Methodology and Applications, Springer- Verlag, Berlin , 2004.

Đorđević, P., Mihajlović, I., Živković, Ž. Comparison of linear and nonlinear statistics methods applied in industrial process modeling procedure, Serbian Journal of Management, 6 (2) (2010) 189 – 198.

Đorđević, P., Nikolić, Đ., Jovanović, I., Mihajlović, I., Savić, M., Živković, Ž. Episodes of extremely high concentrations of SO₂ and particulate matter in the urban environment of Bor, Serbia, Environmental Research, 126(2013) 204–207.

Đurić, I., Mihajlović, I., & Živković, Ž. Kinetic modeling of different bauxite types in the Bayer leaching process. Canadian Metallurgical Quarterly, 49 (2010a) 209-218.

Đuric, I., Mihajlovic, I., Bogdanovic, D., Živkovic, Ž., Clay Min., 45 (1)(2010b) 107.

Djurić, I.. Đorđević, P., Mihajlović, I., Nikolić Đ., & Živković, Ž. Prediction of Al₂O₃ leaching recovery in the Bayer process using statistical multilinear regression analysis. Journal of Mining and Metallurgy, Section B: Metallurgy, 46 (2010c) 75- 86.

Đurić, I., Mihajlović, I., Živkoviž, Ž.,Kešelj, D., Artificial neural network prediction of aluminum extraction from bauxite in the Bayer process (Article), Journal of the serbian chemical society, 77 (9) (2012) 1259-1271.

Eldin, N.N., Senoucci, A.B., Condition rating of rigid pavements by neural networks. Can. J. Civil Eng. 22 (1995) 861- 870.

EU Directive, Council Directive 96/61/EC of 24 September 1996 concerning integrated pollution prevention and control, Official Journal L 257, 1996, 0026.

EU Directive, Council Directive 2006/21/EC of 15 March 2006 on the management of waste from extractive industries and amending Directive 2004/35/EC, Official Journal L 102, 2006, 15.

EU, 1999. 1999/30/CE Council Directive relating to limit values for sulphur dioxide, nitrogen dioxide and oxide of nitrogen, particulate matter and lead in ambient air. The Council of the European Union.

Eykhoff, P. (1974). System Identification. John Wiley.

Fayyad, U., Piatetsky-Shapiro, G., Smyth, P. From data mining to knowledge discovery in databases, Artificial Intelligence Magazine, 17 (1996) 37–54.

Fisher, R., C., (1925), Statistical Methods for Research Workers, University of Adelaide, Australia, ISBN 0-05-002170-2.

Forsberg, L.S., Ledin, S., Sci. Total Environ., 358(2006) (1–3), 21.

Freij, S.J. & Parkinson, G.M., Hydrometallurgy, 78(2005) 246–55.

Fullana, M., Trebelisi, F., Recasens, F., Use of neural net computing for statistical and kinetic modelling and simulation of supercritical fluid extractors, Chemical Engineering Science, 55 (2000) 79-95.

Galbraith P., Clatworthy, N. Beyond standard models-meeting the challenge of modeling, Educational Studies in Mathematics, 21 (1990) 137-163.

Gaska, K., Wandrasz, A.J., Mathematical modeling of biomass fuels formation process, Waste Management, 28_(6) (2008)973–985.

Gilchrist, J.D., 1989. Extraction Metallurgy, Third Edition, Pergamon Press, Oxford OX3 OBW, U.K. pp 311-313.

Giraldo-Zuniga, A.D., Arevalo-Pinedo, A., Rodrigues, R.M., Lima, C.S., & Feitosa, A.C. Kinetic drying experimental data and mathematical model for jackfruit slices. Ciencia Y Tecnologia Alimentaria, 5 (2006) 89-92.

Gojić, M., 2006. Metallurgy of steel, Second Edition, University in Zagreb, Croatia, pp. 353-357.

Golden, B., Aiguier, M., & Krob, D. Modeling of complex systems II: A minimalist and unified semantics for heterogeneous integrated systems. Applied Mathematics and Computation, 2018 (2012) 8039-8055.

Gontijo, G.S., Brandao de Araujo, A.C., Prasad, S., Vasconcelos, L.G.S., Alves, J.J.N. & Brito, R.P., Improving the Bayer process productivity – An industrial case study. *Min. Eng.* 22 (2009) 1130–1136.

Gorai, B., Jana, R.K., Premchand, *Resour. Conserv. Recy.*, 39 (4) (2003) 299.

Großmann, K., Wiemer, H., Großmann, K.K., Methods for Modelling and Analysing Process Chains for Supporting the Development of New Technologies. *Procedia Materials Science*, 2(2013)34-42.

Guneri, A.F., Ertay, T., Yucel, A. An approach based on ANFIS input selection and modeling for supplier selection problem. *Expert Systems with Applications*, 38 (2011) 14907-14917.

Hawking, S. (1998). *A Brief History of Time*. New York, USA: Bantam Books.

Habashi, F., *J. Min. Metall. Sect. B-Metall.*, 45 (1) (2009) 1.

Habashi, F., (1997) *Handbook of Extractive Metallurgy*, Wiley, New York, NY, USA, vol. 1.

Hofkirchner, W., Schafranek, M, General System Theory, Philosophy of Complex Systems, in *Handbook of the Philosophy of Science*, 10 (2011) 177–194.

Hurwitz, A. (1895). Über die Bedingungen, unter welchen eine Gleichung nur Wurzeln mit negativen reellen Theilen besitzt. *Mathematische Annalen*, 46, 273–284 (in German).

Jamialahmadi, M. & Muller-Steinhagen, H. Determining silica solubility in Bayer process liquor. *JOM*, 50(11) (1998) 44–49.

Jang, J.S.R. ANFIS: Adaptive-network-based fuzzy inference system. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, 23 (03) (1993)665-658.

Jang, M., Cai, L., Udeani, G., Slowing, K., Thomas, K., Beecher, C., Fong, H., Farnsworth, N., Kinghorn, A.D., Mehta, R., Moon, R., Pezzuto, J. Cancer Chemopreventive Activity of Resveratrol, a Natural Product Derived from Grapes. *Science Magazine*, 275 (1997) 218-220.

Johnson, J.B., Omland, K. Model selection in ecology and evolution. *Trends in Ecology and Evolution*, 19(2)(2004) 101-108.

Joihanyak, Z.C., & Kovacs, J. Fuzzy model based prediction of ground-level ozone concentration. *Acta Technica Jauronensis*, 4 (2011) 113- 124.

Jorjani, E., Chelgani, S.C., Mersoghili, Sh. Prediction of microbial desulfurization of coal using artificial neural networks. *Minerals Engineering*, 20(2007) 1285-1292.

Jovanović, R., Cvetinović., D., Erić, M., Rašuo, B, Adžić., M., Sensitivity analysis of different kinetic factors for numerical modeling of Serbian lignite devolatilization process. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 72 (2014) 489–500.

Kemp, S.J., Zaradic, P., Hansen, F. An approach for determining relative input parameter importance and significance in artificial neural networks. *Ecological modelling*, 204 (2007) 326–334.

Kersch, C., Peretó Ortiz, S., Woerlee, G.F., Witkamp, G.J., *Hydrometallurgy*, 72 (1–2) (2004) 119.

Kilickap, E. Optimization of cutting parameters on delamination based on Taguchi method during drilling of GFRP composite. *Expert Systems with Applications*, 37 (2010) 6116–6122.

Kunst, R., M. 2003. Testing the relative predictive accuracy: A critical viewpoint, University of Viena.

Lak, S., Delacoste, M., Baran, P., Dimopoulos, I., Lauga, J., Aulagnier, S. Application of neural networks to modelling nonlinear relations in ecology. *Ecological modelling*, 90 (1996) 39-52.

LEAP-Local Environmental Action Plan Bor, Municipality, Bor, 2003.

Li, J., Prestidge, C.A. and Addai-Menach, J. *Crystal Growth*, 219 (2000) 451–64.

Li, Z., Mukai, K., Zeze, M., Mills, K.C. Determination of the surface tension of liquid stainless steel. *Journal of materials science*, 40(2005) 2191-2195.

Li, H., Addai-Mensah, J., Thomas, C.J. and Gerson, R.A. *J. Crystal Growth*, 279 (2005) 508–20.

Lippmann, R.P. An introduction to computing with neural nets. *IEEE ASSP Magazine*, April. 1987.

Lorenz, E. The Circulation of the Atmosphere. *American Scientist*, 54 (1966) 402–420.

Lyapunov, A. M. (1892), The General Problem of the Stability of Motion (In Russian), Doctoral dissertation, Univ. Kharkov. English translations: (1) Stability of Motion, Academic Press, New-York & London, 1966. (2) The General Problem of the Stability of Motion, (A.T. Fuller trans.) Taylor & Francis, London 1992. Included is a biography by Smirnov and an extensive bibliography of Lyapunov's work.

Maani, K., Maharraj, V. Links between systems thinking and complex decision-making. *System Dynamics Review*, 20(1) (2004) 21-48.

Maani, K. E., Cavana. R. Y. 2007. Systems Thinking, System Dynamics: Understanding Change and Complexity, Auckland, NZ, Prentice Hall.

Machold, T., Macedi, E., Larid, D.W., May, P.M. and Hefter, G.T. *Hydrometallurgy*, 99(2009) 51–57.

Matlab 7.0, The MathWorks, 3 Apple Hill Drive Natick, MA 01760-2098, USA, available at: <http://www.mathworks.com>

Maxwell, J. C. On Governors. *Proceedings of the Royal Society of London*, 16 (1868) 270–283.

McClure, B. A. (1998). Putting a New Spin on Groups: The Science of Chaos. Mahway, NJ: Lawrence Erlbaum Associates.

Meradi, H.S. Bouhousche, S., Lahreche, M. Prediction of bath temperature using neural networks. *Proceedings of world academy of science, Engineering and Technology*, 17 (2006) 319 – 323.

Mihajlović, I., Šrbac, N., Živković Ž., & Ilić, I. Kinetics and mechanism of As₂S₂ oxidation. *Journal of the Serbian chemical society*, 70 (2005) 869-877.

Mihajlovic, I., Strbac, N., Zivkovic, Ž., Kovacevic, R., & Stehernik, M. A potential method for arsenic removal from copper concentrates. *Minerals Engineering*, 20 (2007) 26-33.

Mihajlovic, I. Nikolić Đ., Jovanović A. 2007. Osnove teorije sistema – Inženjerski menadžment pristup, Univerzitet u Beogradu, Tehnički fakultet u Boru, (autorizovana predavanja).

Mihajlović, I., Šrbac, N., Živković, Ž., Živković, D. Upravljanje kvalitetom vazduha u okolini topionice bakra, Zbornik radova, Skup privrednika i naučnika (SPIN08), 06-07. November, 2008. p. 282- 286. ISBN 978-86-7680-164-0. (In Serbian)

Mihajlović, I., Šrbac, N., Balanović, Lj., Živković, Ž., & Jovanović, A. Numerical modelling of the vacuum degassing process of molten steel with advanced characteristics. Optoelectronics and Advanced Materials – rapid communications, 4 (2010a) 385 – 389.

Mihajlović, I., Nikolić, Đ., Šrbac, N., Živković, Ž. Statistical modelling in ecological management using the artificial neural networks (ANNs). Serbian Journal of Management, 5 (1) (2010b) 39 - 50 .

Mihajlović, I., Šrbac, N., Đorđević, P., Ivanović, A., & Živković, Ž. Technological process modelling aiming to improve its operations management. Serbian Journal of Management, 6 (2) (2011) 135 – 144.

Mihajlović, I., Šrbac, N., Nikolić, Dj., & Živković, Ž. Potential metallurgical treatment of the copper concentrates with high arsenic content. The Southern African Institute of Mining and Metallurgy, 111 (2011a) 409-416.

Mihajlovic, I., Šrbac, N., Đorđević, P., Mitovski, A., Nikolić, Đ. & Živković, Ž. Optimum conditions for copper extraction from the flotation waste using factorial experimental design. Environment protection engineering, 38 (2012) 171 – 184.

Mihajlovic, I., Fedajev, A., Nikolic, I., Zivkovic, Z. Nonlinear Statistical Methodology Applied on Modeling the Growth Correlation of Some Global Macroeconomic Parameters. Journal of entrepreneurship and innovation, 5(2013a) 1-17.

Mihajlović, I., Živković, Ž., Đurić, I., Đorđević., P. Technological process optimization based on numerical modelling approach, 27. – 29. Juni 2013: 3. Symposium, Environmental Management and Material Flow Management (EMFM 2013b).

Mihajlović, I., Đurić, I., Živković, Ž. ANFIS based prediction of the aluminium extraction from boehmite bauxite in the Bayer process. Polish Journal of Chemical Technology, 16(1)(2014a)103-109.

Mihajlović, I., Živković, Ž., Milošević, i., Đorđević, P., Development of the algorithm for selection of appropriate numerical modeling approach, International May Conference on Strategic Management - IMKSM2014 , 23-25 May (2014b), Bor, Serbia.

Minić, D., Šrbac, N., Mihajlović, I., Živković, Ž. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 82(2)(2005)383-388.

MLAB, Civilized Software, Inc. Available from: <www.civilized.com>.

Montgomery, D.C., (1976). Design and Analysis of Experiments. New York, USA: Wiley.

Moroney, R.N. Spurious of virtual correlation errors commonly encountered in reduction of scientific data. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, 77&78 (1998) 543-553.

Nikolić, Đ., Milošević, N., Mihajlović, I., Živković, Ž., Tasić, V., Kovačević, R., Petrović, N. Multi-criteria Analysis of Air Pollution with SO₂ and PM₁₀ in Urban Area Around the Copper Smelter in Bor, Serbia. Water Air Soil Pollut., 206(1-4)(2010) 369–383.

Nikolić, Đ., Milošević, N., Živković, Ž., Mihajlović, I., Kovačević, R., Petrović, N. J. Serb. Chem. Soc., 76 (4)(2011) 625.

Nikolić, M., Teodorović, D., A simultaneous transit network design and frequency setting: Computing with bees. Expert Systems with Applications, In press, Available online 3 June 2014.

Noori, R., Hoshyaripour, G., Ashrafi, K., & Araabi, B.N. Uncertainty analysis of developed ANN and ANFIS models in prediction of carbon monoxide daily concentration. Atmospheric Environment, 44 (2010) 476 – 482.

Oughlis-Hammache, F., Hamaidi-Maouche, N., Aissani-Benissad, F., Bourouina-Bacha, S. J. Chem. Eng. Data, 55 (7) (2010) 2489.

Ozdemir H., Demir G., Altay G., Albayrak S., & Bayat C. Prediction of Tropospheric Ozone Concentration by Employing Artificial Neural Networks. Environmental Engineering Science, 25 (2008) 1249-1254.

Palmer, D.A., Benezeth, P., Weselowski, D.J. & Helc, S. Experimental study of the dissolution of aluminum phases as a function of temperature, caustic concentration and additives. In Light Metals Symposium. 15–17 November 2001 (pp. 5–10), Warrendale, Pennsylvania. USA, The Minerals, Metals & Materials Society.

Panais, D., & Paspaliaris, I. Erzmetall, 56(2)(2003) 75–80.

Panias, D., Asimidis, P. & Paspaliaris, I. Solubility of boehmite in concentrated sodium hydroxide solutions: Model development and assessment. *Hydrometall.*, 59 (2001) 15–29.

PASW Statistics, formerly called SPSS Statistics, 2009, SPSS Inc., Chicago, IL.

Pelino, M., Karamanov, A., Aloisi, M., Taglieri, G., Ergun, O.N., Coruh, S., Vitrification of copper flotation waste. Global Symposium on Recycling, Waste Treatment and Clean Technology, Madrid, Spain, 26–29th September 2004.

Pereira, J.A.M., Schwaab, M., Dell’Oro, E., Pinto, J.C., Monteiro, J.L.F. & Henriques, C.A. The kinetics of gibbsite dissolution in NaOH. *Hydrometall.*, 96 (2009) 6–13.

Perera, L.P., & Soares, C.G. Lyapunov and Hurwitz based controls for input–output linearization applied to nonlinear vessel steering. *Ocean Engineering*, 66 (2013) 58–68.

Routh, E. J. (1877). A Treatise on the Stability of a Given State of Motion: Particularly Steady Motion. Hampshire, UK: Macmillan and co.

Rummelhart, D.E. and McClelland, J.L. (1986). Parallel Distributed Processing. MIT Press.

Ryan, M., Muller, C. Keith, H.J.D., Cameron, K.C. The use of artificial neural networks (ANNs) to simulate N₂O emissions from a temperate grassland ecosystem. *Ecological Modelling*, 175 (2004) 189–216.

Sa’idi, E., Anvaripour, B., Jaderi, F., Nabhani, N. Fuzzy risk modeling of process operations in the oil and gas refineries. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 30 (2014) 63–73.

Sayen,, E., & Bayramogly, M. Statistical Modelling of Sulphuric Acid Leaching of TiO₂, Fe₂O₃ and Al₂O₃ From Red Mud. *Trans IchemE*, 79(2001) 291 – 296.

Savić, M., Mihajlović, I., Živković, Ž. An ANFIS – based air quality model for prediction of SO₂ concentration in urban area. *Serbian Journal of Management*, 8 (1) (2013) 25 – 38.

Seginer, I., Boulard, T., Bailey, B.J. Neural network models of the greenhouse climate. *J. Agric. Eng. Res.*, 59 (1994) 203-216.

Schindel, U., Jäger, U., Wolff D. Modeling and simulation. *Microprocessing and Microprogramming*, 10 (2–3) (1982) 139–151.

Seyssiecq, I., Veesler, S. , and Boistelle, R., J. *Crystal Growth*, 169(1996) 124–28.

Shang, S.L., Wang, Y., Du, Y., Tschopp, M.A., Liu, Z.K. Integrating computational modeling and first-principles calculations to predict stacking fault energy of dilute multicomponent Ni-base alloys. *Computational Materials Science*, 91(2014) 50-55.

Sharp, H.J., Brinduy, W.G., Harahari, N.B. *Journal of the American Ceramic Society*, 49 (1966) 379.

Sluiter, M.H.F. First principles in modelling phase transformations in steels. *Phase Transformations in Steels*, (2012) 365-404.

Sieverts, A. The Absorption of Gases by Metals. *Zeitschrift für Metallkunde*, 21 (1929) 37–46.

Sjöberg, J, Zhang, Q., Ljung, L., Benveniste, A., Delyon, B., Glorennec, P.Y., Hjalmarsson, H., Juditsky, A. Nonlinear black-box modeling in system identification: a unified overview. *Automatica*, 31(12) (1995) 1691–1724.

Slack, N., Chambers, S., Johnston, R. 2010. Operations management – sixth edition, London, England, Prentice Hall.

Smiljanić, R., Lazić, D., Gligorić, M., Jotanović, M., Živković, Ž., Mihajlović, I. Modelling the process of Al(OH)₃ crystallization from industrial sodium aluminate solutions using artificial neural networks. *Journal of the serbian chemical society*, 76 (8) (2011) 1163-1175.

Songqing, G., Zhonling, Y. & Lijuan, Q. Investing method of Bayer digestion process of diasporic bauxite in China. In Light Metals Symposium. 17–21 February 2002 (pp. 83–88), Warrendale, Pennsylvania. USA, The Minerals, Metals & Materials Society.

Straussfogel, D., von Schilling, C. 2009. Systems Theory, International Encyclopedia of Human Geography, 151–158.

Šrbac, N., Mihajlović, I., Živković, D., Živković, Ž., Andelić, B. Thermodynamic and kinetic analysis of the Cu-Fe-S system oxidation process. Journal of the University of Chemical Technology and Metallurgy, 41 (2) (2006) 161-166.

Šrbac, N., Živković, Ž., Mihajlović, I., (2002). Zbirka zadataka iz metalurgije obojenih metala, Univerzitet u Beogradu, Tehnički fakultet u Boru.

Taguchi, G., (1992). Taguchi on Robust Technology Development: Bringing Quality Engineering Upstream. ASME Press.

Takagi, T. & Sugeno, M. Fuzzy identification of systems and its application to modeling and control. IEEE Trans. Systems. Man. Cybernetics, 15(1)(1985)116–132.

Taylor, C.F., Paton, N.W., & Garwood, K.L. A systematic approach to modeling, capturing, and disseminating proteomics experimental data. Nature Biotechnology, 21 (2003) 247 - 254.

Terence, I. (1987) Aristotle's First Principles. Oxford: Oxford University Press.

Trail, M., Tsimpidi, A.P., Liu, P., Tsigaridis, K., Rudokas, J., Miller, P., Nenes, A., Hu, Y., Russell, A.G. Sensitivity of air quality to potential future climate change and emissions in the United States and major cities. Atmospheric Environment, 94 (2014) 552–563.

Ungar, L.H., Hartman, E.J., Keeler, J.D., Martin, G.D. Process modeling and control using neural networks. Am. Inst. Chem. Eng. Symp. Ser., 92(1996) 57-66.

Venegas, L.E., Mazzeo, N.A., Dezzutti, M.C. A simple model for calculating air pollution within street canyons. Atmospheric Environment, 87(2014) 77–86.

Vinals, J., Roca, A., Benevente, O., Hernandez, M.C., Herreros, O. Removal of Arsenic Selenium and Tellurium from Base Metal Concentrates. In: Palfy, P., Vircikova, E. (Eds.), Proceedings of the V International Conference Metallurgy, Refractories and Environment. Kosice, Stara Lesna, Slovakia, May 13–16, 2002, pp. 481–486.

Watling, H. , Loh, J. andGatter, H. Hydrometallurgy, 55 (2000)275–88.

Weir, G. (1991). Differential Equations – A Modeling Approach. Boston, USA: Addison-Wesley.

Wernick, P. & Lehman, M.M. Software process white box modelling for FEAST/1. *J. Syst. Software*, 46(1999) 193–201.

Whittington, B.I., Fletcher, B.L. & Talbot, C. The effect of reaction conditions on the composition of desilication product (DSP) formed under simulated Bayer conditions. *Hydrometall.*, 49(1998) 1–22.

WHO (World Health Organization), 2001. Air Quality Guidelines for Europe, (2nd edition) WHO Regional Publications, Regional Office for Europe, Copenhagen, Denmark.

Willis, M.J., Tham, M.T. (2009). Advanced process control, School of Chemical Engineering and Advanced Materials, Newcastle University.

Wu, J., & David, J.L. A spatially explicit hierarchical approach to modeling complex ecological systems: theory and applications. *Ecological Modelling* , 153 (2002) 7–26.

Yetilmezsoy, K., Fingas, M. & Fieldhouse, B. An adaptive neuro-fuzzy approach for modeling of water-in-oil emulsion formation. *Colloid. Surface. A*. 389(1–3) (2011) 50–62.

Zakharov, N.I., Nedopekin, F.V., Trotsan, A. I., Kharlashin, P. S. Mathematical simulation of mass-transfer processes in off-furnace degassing of metal by floating inert gas bubbles. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 78 (3) (2005) 482-486.

Zeng, W., Chen, N. Artificial neural network method applied to enthalpy of fusion of transition metals. *Journal of Alloys and Compounds*, 257 (1997) 266 – 267.

Zhang, Y.F., Li, Y.H. & Zhang, Y. Phase diagram for the system Na₂O–Al₂O₃–H₂O at high alkali concentration. J. of Chem. & Eng. Data. 48(3) (2003) 617–620.

Zheng-Ming, G., & Wei-Ren, J. Chaos, control and synchronization of a fractional order rotational mechanical system with a centrifugal governor. Chaos, Solitons and Fractals, 33 (2007) 270–289.

Zhu, Y., Li, Y.P., Huang, G.H., Fu, D.Z. Modeling for planning municipal electric power systems associated with air pollution control – A case study of Beijing. Energy, 60(1)(2013) 168–186.

Živković, Ž., Mitevska, N., Mihajlović, I., & Nikolic, Đ. The influence of the silicate slag composition on copper losses during smelting of the sulfide concentrates. Journal of Mining and Metallurgy, Section B: Metallurgy, 45 (2009a) 23-35.

Zivkovic , Ž., Mihajlovic , I., & Nikolic, Đ., Artificial neural network method applied on the nonlinear multivariate problems. Serb. J. Manag., 4(2) (2009b) 137–49.

Živković, Ž., Mihajlović, I. Đurić I., Štrbac,N. Statistical Modeling of the Industrial Sodium Aluminate Solutions Decomposition Process. Metall. Mater. Trans., B 41 (2010) 1116–1122.

Web reference:

Encyclopedia Britannica: <http://www.britannica.com/EBchecked/topic/387006/scientific-modeling>

Fakultet Tehničkih Nauka u Novom Sadu, Erdeljan A., autorizovana predavanja: Modeliranje i simulacija sistema, dostupno na: http://ccd.uns.ac.rs/aus/miss/miss_doc/Predavanja/B1%20Modeliranje%202012.pdf

Laerd Statistics: <https://statistics.laerd.com/statistical-guides/pearson-correlation-coefficient-statistical-guide.php>

Metal prices world market: <http://www.infomine.com/investment/metal-prices/copper/>

http://www.princeton.edu/~achaney/tmve/wiki100k/docs/Physical_law.html (last accessed July the 3rd 2014).

Stokes, George Gabriel (STKS837GG). A Cambridge Alumni Database. University of Cambridge, dostupno na: <http://venn.lib.cam.ac.uk/cgi-bin/search.pl?sur=&suro=c&fir=&firo=c&cit=&cito=c&c=all&tex=%22STKS837GG%22&sy=e=&eye=&col=all&maxcount=50>

York University: <http://www.psych.yorku.ca/lab/psy6140/lectures/Collinearity2x2.pdf>

Soli Deo gloria

8. PUBLIKACIJE KOJE SU PROIZAŠLE KAO REZULTAT ISTRAŽIVANJA PRIKAZANIH U DISERTACIJI

Radovi u časopisima:

- a) Časopisi sa impakt faktorom

Mihajlović, I., Đurić, I., Živković, Ž. ANFIS based prediction of the aluminium extraction from boehmite bauxite in the Bayer process. Polish Journal of Chemical Technology, 16(1)(2014)103-109. [IF 2013: **0.474**]

Mihajlovic, I., Šrbac, N., Đorđević, P., Mitovski, A., Nikolić, Đ. & Živković, Ž. Optimum conditions for copper extraction from the flotation waste using factorial experimental design. Environment protection engineering, 38 (2012) 171 – 184. [IF 2013: **0.439**]

Đorđević, P., Nikolić, Đ., Jovanović, I., **Mihajlović, I.**, Savić, M., Živković, Ž. Episodes of extremely high concentrations of SO₂ and particulate matter in the urban environment of Bor, Serbia, Environmental Research, 126(2013) 204–207. [IF 2013: **3.951**]

- b) Časopisi nacionalnog značaja

Savić, M., **Mihajlović, I.**, Živković, Ž. An ANFIS – based air quality model for prediction of SO₂ concentration in urban area. Serbian Journal of Management, 8 (1) (2013) 25 – 38.

Saopštenje na skupovima:

- a) Saopštenja na skupovima internacionalnog značaja:

Mihajlović, I., Živković, Ž., Milošević, i., Đorđević, P. Development of the algorithm for selection of appropriate numerical modeling approach, International May Conference on Strategic Management - IMKSM2014 , 23-25 May 2014, Bor, Serbia.

Mihajlović, I., Živković, Ž., Đurić, I., Đorđević, P., Technological process optimization based on numerical modelling approach, 27. – 29. June 2013: 3. Symposium, Environmental Management and Material Flow Management (EMFM 2013).

BIOGRAFIJA

Ivan Mihajlović je rođen u Zaječaru 1973. godine. Osnovnu i srednju školu je završio u Boru. Tehnički fakultet u Boru – studijski program Metalurško inženjerstvo je završio 2001. godine. Magistarske studije je završio na istom fakultetu 2004. godine, takođe na odseku za metalurško inženjerstvo. Doktorsku disetraciju na studijskom programu Metalurško inženjerstvo je odbranio 2006. godine.

Tokom 2005-2006. pohađao je Sertifikacioni program IPMA (International Project Management Association) za sticanje zvanja Sertifikovani vođa projektnog zadatka IPMA level D. Sertifikacioni program je organizovan na Fakultetu Organizacionih Nauka u Beogradu, pod rukovodstvom Petra Jovanovića, Predsednika YUPMA Srbije.

Tokom maja 2008. Pohađao je HP GET-IT (Graduate Entrepreneurship Training through Information Technologies) pokrenut od strane Hewlett Packard-a (HP). Nakon završetka Guidance Course-a for the HP Microenterprise Development Program, koji je organizovan u Cirihu (Švajcarska) dobio je sertifikat, čime je uvršten u zvaničnu listu GET-IT trenera i može vršiti obuku kako novih trenera, tako i polaznika kursa. Cilj kursa je intenzifikacija uvođenja IT u preduzetništву.

Tokom aprila 2009. u Ženevi je uspešno završio obuku za Master trenera programa GET-IT pod pokroviteljstvom Hewlett Packard-a (HP) i Micro Enterprise Acceleration Instituta (MEA-I). Nakon toga postaje Master trener GET IT programa.

Nakon diplomiranja 2001. godine angažovan je na Tehničkom fakultetu u Boru. Od 2001. do 2012., biran je u sva naučna zvanja, počevši od asistenta pripravnika do vanrednog profesora. 2012. godine, izabran je u zvanje vanrednog profesora.

Na Tehničkom fakultetu u Boru izvodio je vežbe i predavnja na odseku za Ekstraktivnu metalurgiju (predmeti: Metalurgija obojenih metala, Toplotna tehnika i peći u metalurgiji); potom, nakon pokretanja studijskog programa Inženjerski menadžment, angažovan je i u nastavi na predmetima Upravljanje proizvodnjom, Upravljanje projektima, Teorija sistema, Logistika i Operativni menadžment.

Ivan Mihajlović je predsednik Organizacionog odbora Internacionalne Majske Konferencije o Strategijskom menadžmentu (počevši od 2005. Godine). Glavni je urednik časopisa Serbian Journal of Management, član je uređivačkih odbora većeg broja internacionalnih časopisa. Učestvovao je kao član projektnog tima većeg broja nacionalnih i internacionalnih projekata. Autor je ili koautor više od 40 radova publikovanih u časopisima sa impakt faktorom. Održao je više predavanja po pozivu na inostranim univerzitetima.

Прилог 1.

Изјава о ауторству

Потписани-а Иван Михајловић

Број индекса _____

Изјављујем

Да је докторска дисертација под насловом:

Развој алгоритма за селекцију адекватног модела процеса на основу структуре улазних података

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да предложена дисертација у целини ни у деловима није била предложена за добијање било које дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени,
- да нисам кршио/ла ауторска права и искористио интелектуалну својину других лица.

У Београду, _____

Потпис докторанда

Прилог 2

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора Иван Михајловић

Број индекса _____

Студијски програм Инжењерски менаџмент

Наслов рада Развој алгоритма за селекцију адекватног модела процеса на основу структуре улазних података

Ментор Проф. Др Живан Живковић

Потписани/а Иван Михајловић

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла за објављивање на порталу **Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду**.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског звања доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и публикацијама Универзитета у Београду.

У Београду, _____

Потпис докторанда

Прилог 3.

Изјава о коришћену

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

Развој алгоритма за селекцију адекватног модела процеса на основу структуре улазних података

Која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице () за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство
2. Ауторство-некомерцијално
3. Ауторство-некомерцијално- без прераде
4. Ауторство-некомерцијално-делити под истим условима
5. Ауторство-без прераде
6. Ауторство-делити под истим условима

(Молимо да заокружите санмо једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

У Београду, _____

Потпис докторанда
