

**ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**YAPAY SİNİR AĞI TEMELLİ MODEL ESASLI KONTROL
ALGORİTMASININ BİR POLİMER REAKTÖRÜNE UYGULANMASI**

Erkin ETİKE

KİMYA MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

**ANKARA
2009**

Her hakkı saklıdır

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

YAPAY SİNİR AĞI TEMELLİ MODEL ESASLI KONTROL ALGORİTMASININ BİR POLİMER REAKTÖRÜNE UYGULANMASI

Erkin ETİKE

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Kimya Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Gülay ÖZKAN

Yapılan çalışmada 1.6 litrelik soğutma ceketli kesikli bir reaktörde stirenin serbest radikalik çözelti polimerizasyonunun dinamiği ve sıcaklık kontrolü teorik ve deneysel olarak incelenmiştir.

Çalışmanın aşamaları teorik ve deneysel olmak üzere iki ana bölüme ayrılmıştır. Teorik çalışmalarda sürecin analitik modeli MATLAB® ortamında Simulink® kullanılarak çıkarılmıştır. Sisteme verilen ısı PRBS formunda ve uygun büyüklükte değiştirilerek, reaktör içi sıcaklığın değişmesi sağlanmıştır. Isı ayarlanabilen değişken ve reaktör içi sıcaklığı kontrol edilen değişken olarak seçildiği durumda kontrol algoritmasında kullanılabilecek sistem modelinin tanımlanması için gerekli olan veriler toplanmış ve bu veriler ile Yapay Sinir Ağı'nın (YSA) eğitimi sağlanmıştır. Eğitim için Levenberg-Marquardt algoritması kullanılmıştır. Benzetim ortamında, reaktör sıcaklığı yapay sinir ağı temelli model öngörülü kontrol algoritması ile gerçekleştirilmiştir.

Deneysel çalışmalarda, yapay sinir ağı temelli model öngörülü kontrol algoritması Visual Basic dilinde yazılmıştır. Kontrol etkin ayar parametresi olan ağırlık faktörünün bir ileri besleme fonksiyonu olarak belirlenmesi gerçekleştirilmiştir. Yapay sinir ağı temelli model öngörülü kontrol algoritması, ayarlanan parametreleri ile reaktör sıcaklığının, optimum sıcaklık profilini başarı ile takip etmesini sağlamıştır.

Ayrıca tepkime boyunca ölçülmesi zor olan monomer derişimi, oluşturulan radyal tabanlı fonksiyon ağı yardımıyla başarı ile tahmin edilmiştir. Stirenin polimerleşme tepkimesinin gerçekleştiği soğutma ceketli kesikli bir tepkime kabının analitik modeli, teorik YSA modeli ve deneysel YSA modeli karşılaştırılarak YSA modellerinin sistemi temsil etme yeteneği gözlenmiştir.

Şubat 2009, 79 sayfa

Anahtar Kelimeler: Yapay sinir ağı, polistiren, sistem tanımlama, model öngörülü kontrol, radyal tabanlı fonksiyon ağı

ABSTRACT

M.Sc. Thesis

APPLICATION OF MODEL BASED CONTROL BASED ON ARTIFICIAL NEURAL NETWORK TO A POLYMERIZATION REACTOR

Erkin ETİKE

Ankara University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Chemical Engineering

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Gülay ÖZKAN

In this work the dynamic behaviour and temperature control of free radical solution polymerisation of styrene in a jacketed 1.6 L batch reactor is studied both theoretically and experimentally.

The work consists of theoretical and experimental studies. In the theoretical part, the analytic model of the process is determined and implemented to MATLAB® Simulink® environment. Heat is introduced to the model in PRBS form and reactor temperature change is recorded. These data are used for system identification in order to build an artificial neural network (ANN) model which will be used by the control algorithm having heat introduced as the manipulated variable and reactor temperature as the controlled variable. The training of the ANN was done by Levenberg-Marquardt algorithm. Reactor temperature is controlled with neural network model predictive control algorithm by simulation.

In the experimental part, neural network model predictive control algorithm is written by Visual Basic programming language. Control weighing factor is determined as a feedforward function. Experimental control of the reactor temperature on optimal temperature profile was achieved successfully by Neural network model predictive control algorithm

Moreover, the monomer concentration which is hard to measure directly during reaction, was accurately estimated by the radial basis function network built. Analytical, theoretical ANN and experimental ANN models of the batch styrene polymerisation reactor, are compared and the representation ability of the ANN models were observed.

February 2009, 79 pages

Keywords: Neural network, polystyrene, sytem identification, model predictive control, radial basis function network

TEŞEKKÜR

‘Polistiren Üretimine Yapay Sinir Ağı Temelli Model Öngörülü Kontrolün Uygulanması’ başlıklı 107M638 no’lu proje kapsamında verdiği destekten dolayı TÜBİTAK’a teşekkür ederim.

Çalışmalarım boyunca yardımlarıyla beni yönlendiren hocam Doç. Dr. Gülay ÖZKAN’a, tecrübelerinden yararlandığım Prof. Dr. Hale HAPOĞLU ve Prof. Dr. Mustafa ALPBAZ’a, ayrıca ihtiyaç duyduğumda yardım eden araştırma görevlisi ve yüksek lisans öğrencisi arkadaşlara teşekkür ederim.

Her zaman yanımda olup bana güç veren sevgili eşim Şafak ETİKE’ye teşekkür ederim.

Erkin ETİKE

Ankara, Şubat 2009

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
SİMGELER DİZİNİ.....	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	ix
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	xii
1. GİRİŞ.....	1
2. KAYNAK ARAŞTIRMASI.....	5
3. YAPAY SİNİR AĞLARI.....	10
3.1 Yapay Sinir Ağlarının Tanımı.....	10
3.2 Yapay Sinir Ağlarının Tarihçesi.....	11
3.3 Yapay Sinir Ağının Uygulama Alanları.....	13
3.4 Yapay Sinir Ağının Yapısı.....	15
3.5 Yapay Sinir Ağlarında Öğrenme.....	18
3.6 Levenberg-Marquardt Algoritması.....	19
4. MATERYAL VE YÖNTEM.....	23
4.1 Deney Düzenegi.....	23
4.2 Deney Yöntemi.....	25
4.3 Deneysel Çalışmalar İçin Gerekli Hazırlık İşlemleri.....	25
5. STİREN POLİMERİZASYON KİNETİĞİ VE MODELLENMESİ	27
5.1 Stiren Çözelti Polimerizasyonunun Kinetiği.....	27
5.2 Soğutma Ceketli Kesikli Polimer Tepkime Kabının Matematiksel Modeli.....	31
5.3 Tepkime Kabının ve Optimizasyon Programının Simulink® Modelleri...	34
5.3.1 Dinamik model.....	34
5.3.2 Optimum işletim sıcaklığı için Simulink® programı.....	35
6. YSA MODEL ÖNGÖRÜLÜ KONTROL ALGORİTMASI.....	37
7. BULGULAR.....	40
7.1 Kontrolün Teorik Olarak (Benzetim ile) Sağlanması.....	40
7.1.1 Optimum sıcaklık profili.....	40
7.1.2 Dinamik model.....	41

7.1.3 YSA model öngörülü kontrol.....	42
7.2 Kontrolün Deneysel Olarak Sağlanması.....	48
7.2.1 Polimer reaktörü sıcaklığının deneysel kontrolü.....	53
7.3 Monomer Dönüşümünün Teorik Olarak Tahmini.....	61
7.4 Polimer Reaktörü Modellerinin Karşılaştırılması.....	64
7.4.1 Teorik YSA modeli.....	64
7.4.2 Deneysel YSA modeli.....	66
8. TARTIŞMA ve SONUÇ.....	68
KAYNAKLAR.....	72
EKLER.....	75
EK-1 Monomer Dönüşümü İçin Hesaplama.....	76
EK-2 Deneyde Kullanılan Kontrol Programı (Visual Basic).....	77
ÖZGEÇMİŞ.....	79

SİMGELER DİZİNİ

A	Isı aktarım alanı (m^2)
A_d	Başlama basamağı Arrhenius sabiti
A_p	Büyüme basamağı Arrhenius sabiti
A_t	Sonlanma basamağı Arrhenius sabiti
C_p	Karışımın ısı kapasitesi (cal/gmol K)
C_{pc}	Soğutma suyu ısı kapasitesi (cal/gmol K)
D_i	Karıştırıcı çapı (m)
D_t	Tepkime kabı iç çapı (m)
D_{LM}	Logaritmik ortalama çap (m)
E	Aktivasyon enerjisi (cal/mol)
E_d	Başlama tepkimesi aktivasyon enerjisi (cal/mol)
E_p	Büyüme tepkimesi aktivasyon enerjisi (cal/mol)
E_t	Sonlanma tepkimesi aktivasyon enerjisi (cal/mol)
e(t)	Hata
f	Başlatıcı etkinlik faktörü
g	Jel etkisi
h_0	Soğutma suyu film ısı aktarım katsayısı ($W/m^2\ ^\circ C$)
H_i	Karıştırıcı ile tepkime kabı dibi arasındaki mesafe (m)
I	Başlatıcı derişimi (mol/l)
I_0	Başlatıcı başlangıç derişimi (mol/l)
I^*	Aktif başlatıcı radikali
k	Tüm tepkime hız sabiti (1/mol.s)
k_c	Tepkime kabı duvarının ısı iletkenlik katsayısı ($W/m\ ^\circ C$)
k_d	Başlatıcı parçalanma hız sabiti (1/s)
k_i	Başlama tepkimesi hız sabiti (1/s)
k_p	Büyüme basamağı hız sabiti (1/mol.s)
k_r	Karışımın ısı iletkenlik katsayısı ($W/m\ ^\circ C$)
k_{td}	Orantısız sonlanma hız sabiti (1/mol.s)
k_{tc}	Birleşerek sonlanma hız sabiti (1/mol.s)
k_t	Sonlanma basamağı hız sabiti (1/mol.s)

m	Soğutma suyu kütleli akış hızı (kg/s)
m_p	Kurutulan polistiren kütlesi (g)
M	Monomer derişimi (mol/l)
M_0	Monomer başlangıç derişimi (mol/l)
M_n	Sayıca ortalama molekül ağırlığı (g/mol)
M_{nd}	Polistiren istenen molekül ağırlığı (g/mol)
M_w	Ağırlıkça ortalama molekül ağırlığı (g/mol)
N	Karıştırma hızı (devir/dk)
N_1	Minimum maliyet ufku
N_2	Maksimum maliyet ufku
N_u	Kontrol maliyet ufku
P_x^*	x zincir uzunluğuna sahip aktiflenmiş polimer
P_x	x zincir uzunluğuna sahip sonlanmış polimer
Q	Tepkime kabına verilen ısı (cal/s)
R	Gaz sabiti (cal/gmol K)
R_i	Başlama tepkime hızı
R_m	Monomer tepkime hızı (mol/m ³ .s)
$r(t)$	Set noktası
t	Zaman (s)
t_f	Tepkime süresi
T	Tepkime kabı sıcaklığı (K)
T_0	Tepkime başlangıç sıcaklığı (K)
T_c	Soğutma suyu ortalama sıcaklığı (K)
T_{ci}	Soğutma suyu giriş sıcaklığı (K)
T_{co}	Soğutma suyu çıkış sıcaklığı (K)
T_{set}	Set noktasındaki sıcaklık (K)
U	Tüm ısı aktarım katsayısı (cal/m ² s K)
V	Toplam karışım hacmi (m ³)
V_t	Toplam karışım hacmi (ml)
V_c	Soğutma suyu hacmi (m ³)
V_s	Stiren hacmi (ml)
x	Tepkime kabı duvar kalınlığı

X	Dönüşüm
X _d	İstenen dönüşüm

Yunan Alfabesi

α	Kontrol ağırlık faktörü
ΔH	Tepkime ısısı (cal/mol)
λ	Optimizasyon adımı
μ_0	Başlangıç karışımının viskozitesi (cp)
μ_r	Polimerleşme ortamının viskozitesi (cp)
ρ	Toplam karışım yoğunluğu (g/cm ³)
ρ_c	Soğutma suyu yoğunluğu (g/cm ³)
ρ_s	Stiren yoğunluğu (g/cm ³)

Kısaltmalar

PID	Proportional-Integral-Derivative
PRBS	Yalancı-gelişigüzel ikili sinyal (Pseudo-Random Binary Signal)
RAS	Rastgele sinyal (Random Amplitude Signal)
YSA	Yapay Sinir Ağı
NARMA-L2	Nonlinear Auto Regressive Moving Average

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 3.1 Yapay Sinir Ağı.....	11
Şekil 3.2 Perceptron.....	12
Şekil 3.3 Yapay Nöron.....	16
Şekil 3.4 Sigmoid Fonksiyonu.....	18
Şekil 4.1 Deney düzeneği fotoğrafı.....	23
Şekil 4.2 Reaktör fotoğrafı.....	23
Şekil 4.3 Deney düzeneği şeması.....	24
Şekil 4.4 Stiren saflaştırma ünitesi.....	26
Şekil 5.1 Tepkime kabı dinamik modelinin MATLAB® Simulink® ortamındaki genel görünümü.....	34
Şekil 5.2 Optimum işletim sıcaklığı hesaplamalarını gösteren Simulink® ekranı.....	35
Şekil 6.1 Sistem tanımlama aşamasının şematik gösterimi.....	37
Şekil 6.2 YSA Model Öngörülü Kontrol Blok Diyagramı.....	38
Şekil 7.1 Polimerleşme tepkimesinin gerçekleşeceği optimum sıcaklık profilleri.....	40
Şekil 7.2 Reaktör sıcaklığının açık hatta zamanla değişimi ($I_0=0.0125, 0.0150$ ve 0.0185 mol/l).....	41
Şekil 7.3 YSA Model Öngörülü Kontrol Simulink® görünümü.....	42
Şekil 7.4 Eğitim sürecinde hatanın giderek azaldığını ve önceden belirlenmiş bir başarımla koşuluyla ulaşıldığında eğitimin durduğunu gösteren eğri.....	43
Şekil 7.5 Hiperbolik Tanjant Sigmoid Fonksiyonu.....	43
Şekil 7.6 YSA eğitimi için kullanılan veriler ve bu verilerle eğitilen YSA Modelinin çıktıları.....	44
Şekil 7.7 Reaktör sıcaklığının, optimum sıcaklık profilinde YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0125$ mol/l).....	45
Şekil 7.8 Reaktör sıcaklığının, optimum sıcaklık profilinde YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0150$ mol/l).....	46
Şekil 7.9 Reaktör sıcaklığının, optimum sıcaklık profilinde YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0185$ mol/l).....	47
Şekil 7.10 PRBS yük etkisi altında sistem girdi-çıkış verileri.....	48
Şekil 7.11 Oluşturulan YSA'nın şeması.....	49
Şekil 7.12 $\frac{\lambda}{1 + \alpha\lambda} = 0.1$ iken set noktasına basamak etkiler verilerek yapılan deneysel kontrol sonucu.....	52
Şekil 7.13 $\frac{\lambda}{1 + \alpha\lambda} = 5$ iken set noktasına basamak etkiler verilerek yapılan deneysel kontrol sonucu.....	52
Şekil 7.14 Değişken set noktası verildiğinde reaktör sıcaklığının zamanla değişimi (su deneyi).....	53
Şekil 7.15 Polimer için PRBS yük etkisi altında sistem girdi-çıkış verileri.....	54
Şekil 7.16 Reaktör sıcaklığının optimum sıcaklık profilinde YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0125$ mol/l).....	56

Şekil 7.17 Reaktör sıcaklığının YSA model öngörülü algoritma ile kontrol edildiği durum için ayarlanabilen değişkenin zamanla değişimi ($I_0=0.0125$ mol/lit).....	56
Şekil 7.18 Reaktör sıcaklığının optimum sıcaklık profilinde YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0150$ mol/lit).....	57
Şekil 7.19 Reaktör sıcaklığının YSA model öngörülü algoritma ile kontrol edildiği durum için ayarlanabilen değişkenin zamanla değişimi ($I_0=0.0150$ mol/lit).....	57
Şekil 7.20 Reaktör sıcaklığının optimum sıcaklık profilinde YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0185$ mol/lit).....	58
Şekil 7.21 Reaktör sıcaklığının YSA model öngörülü algoritma ile kontrol edildiği durum için ayarlanabilen değişkenin zamanla değişimi ($I_0=0.0185$ mol/lit).....	58
Şekil 7.22 Reaktör sıcaklığının sabit set noktasında YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0126$, $T_{set}=103$ °C).....	60
Şekil 7.23 Reaktör sıcaklığının YSA model öngörülü algoritma ile kontrol edildiği durum için ayarlanabilen değişkenin zamanla değişimi ($I_0=0.0126$ mol/lit, $T_{set}=103$ °C).....	60
Şekil 7.24 $I_0=0.0125$ mol/lit, $I_0=0.0150$ mol/lit ve $I_0=0.0185$ mol/lit için tepkime boyunca monomer derişiminin zamanla değişimi.....	62
Şekil 7.25 Radyal Tabanlı Fonksiyon.....	62
Şekil 7.26 RTFA Mimarisi.....	63
Şekil 7.27 Test verileri kullanıldığında RTFA tarafından tahmin edilen Monomer Derişimi değerleri ile gerçek Monomer Derişimi değerlerinin karşılaştırılması.....	64
Şekil 7.28 Tepkime kabı dinamik modeli için kullanılan YSA'nın mimarisi...	65
Şekil 7.29 Analitik Model ile hesaplanan Reaktör sıcaklığının YSA Modeli ile hesaplanan Reaktör sıcaklığı ile karşılaştırılması. ($I_0=0.0150$ mol/lit).....	65
Şekil 7.30 Deneysel veriler ile eğitilen YSA. (Şekil 7.11'deki ağıın aynısı)....	66
Şekil 7.31 Analitik model, teorik YSA modeli ve deneysel YSA modelinin karşılaştırılması.....	67

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 5.1 Monomer (Stiren) ve başlatıcı (Benzoilperoksit) için kullanılan kinetik sabitler ve sistemin fiziksel sabitleri (Chen and Huang, 1980).....	32
Çizelge 7.1 Üç farklı başlatıcı başlangıç derişimi için açık hat dinamik benzetim sonuçları.....	41
Çizelge 7.2 YSA ile Sistem Tanımlama Parametreleri.....	44
Çizelge 7.3 YSA Model Öngörölü Kontrol Edici Parametreleri.....	45
Çizelge 7.4 Üç farklı başlatıcı başlangıç derişimi ve optimum sıcaklık profilinde gerçekleştirilen kontrol ile elde edilen benzetim sonuçları.....	47
Çizelge 7.5 Su deneyi sistemi YSA Modelinin Ağırlık ve Bias değerleri.....	49
Çizelge 7.6 Polimer deneyi sistemi YSA Modelinin Ağırlık ve Bias değerleri..	55
Çizelge 7.7 Üç farklı başlatıcı başlangıç derişimi ve optimum sıcaklık profillerinde gerçekleştirilen kontrol ile elde edilen deney sonuçları.....	59
Çizelge 7.8 Sabit sıcaklıkta gerçekleştirilen kontrol ile elde edilen deney sonuçları.....	61
Çizelge 8.1 Kontrol etkinliğinin hata kareleri integrali (ISE) ve hata mutlak değerleri integrali (IAE) kriterlerine göre karşılaştırılması.....	70

1. GİRİŞ

Bu çalışmanın konusu modele dayalı kontrol yöntemlerinden model öngörülü kontrolün, yapay sinir ağı yaklaşımı ile bir polimerizasyon reaktörüne teorik ve deneysel olarak uygulanmasıdır. İncelenecek süreç, stirenin serbest radikalik polimerizasyonu, tepkime ürünü polistirendir. Kontrol edilecek değişken reaktör sıcaklığı, ayar değişkeni reaktöre verilen ısıdır.

Ekzotermik tepkimelerin gerçekleştiği proseslerin güvenlik problemleri, birden fazla yatışkın hal şartlarını sağlamaları v.b. problemler nedeniyle üzerinde çalışılması gereklidir. Endüstride bu tip davranış gösteren proseslerden biri de polimerizasyon tepkimeleridir. Polimerizasyon tepkimelerinin ekzotermik, polimerlerin ısı iletkenliğinin düşük ve aşırı viskoz olmaları gibi sebeplerden ısı transferi ve sıcaklık kontrolü son derece zordur. Aynı zamanda polimerizasyon tepkimelerinde ürün kalitesini etkileyen pek çok değişken vardır. Ürün kalitesi denince en başta akla gelen molekül ağırlığının on-line ölçümü zor ve zaman gecikmesi söz konusudur.

Son derece kompleks ve zor bir proses özelliği gösteren polimerleşme, ancak iyi bir kontrol sistemi ile kontrol edildiğinde istenilen özelliklere sahip ürün vermektedir. Bu açıdan proses kontrolün önemi ortaya çıkmaktadır.

Reaktör, damıtma kulesi gibi yüksek verim ve saflık isteyen sistemlerin kontrol uygulamalarında modele dayalı tahmini kontrol algoritmalarının kullanımı önem taşımaktadır. Modele dayalı kontrol tekniklerinin başarısı prosesi ifade eden modelin doğru olarak tespit edilmesine bağlıdır. Bu nedenle proses için uygun modelin çıkartılmasının araştırılması gereklidir. Polimerizasyon tepkimeleri genelde doğrusal olmayan diferansiyel denklemlerle ifade edilirler ve bu denklemlerin çözümünde gelişmiş sayısal çözüm yöntemlerine ihtiyaç vardır. Bu nedenle bu denklemleri kontrol amaçlı kullanmak oldukça zordur. İyi bir kontrol sağlamak için gerekli olan doğru proses modeline sahip olmak gittikçe önem kazanmaktadır (Chen *et al.*, 1994). Ancak, prosesin dinamik modelinin geliştirilmesinin gerektirdiği çok fazla zaman ve efor yüzünden sistemi yeterince temsil edebilen deneysel modeller alternatif olarak

kullanılmaktadır. İstenilen ürün özelliklerinin pazarın ihtiyacına göre sıklıkla değiştiği göz önünde bulundurulduğunda, detaylı matematiksel modellere dayalı kontrol stratejilerinin geliştirilmesi de çok mantıklı ve uygulanabilir olmamaktadır (Tian *et al.*, 2001). Deneysel verilere dayalı modelleme yöntemlerinin önemi bu noktada ortaya çıkmaktadır. Deneysel verilere dayalı modelleme yöntemlerinden çok değişkenli istatistik yaklaşımının (MacGregor *et al.*, 1994) ve yapay sinir ağı yaklaşımının (Zhang *et al.*, 1998) polimerleşme reaktörlerine uygulandığı çalışmalar yapılmıştır. Polimerleşme proseslerinde oluşan pek çok fizikokimyasal olayları matematiksel olarak tanımlamak zor ve hala çok azı anlaşılmış olup modelleme güçlükleri ortaya çıkmaktadır. Bazı işletme noktalarında prosesin girdi-çıkı davranışlarını göstermek için uygun polinom tipi model içeren iletim fonksiyonu kullanmak bir alternatif yöntem olarak düşünülmektedir. Model analitik olarak türetilbildiği gibi genelde deneysel sonuçları da gerektirir. Model parametrelerinin hesabında değişik yöntemler geliştirilmiştir. Bu konuda yapılan araştırmalar önceki yıllara dayanır. Buna göre polimer üretiminde, etkin kontrollerin istendiği yerlerde modele dayalı kontrol sistemleri kullanılmalıdır.

Modele dayalı kontrol sistemlerinde ihtiyaç duyulan proses modelinin elde edilmesinde Yapay Sinir Ağı (YSA) modellerinin kullanımı son on yılda giderek yaygınlaşmıştır (Hussain, 1999).

Yapay Sinir Ağları, insan beynindeki birçok nöronun, ya da basit işlemcilerin birbirlerine değişik etki seviyeleriyle paralel olarak bağlanması ile oluşan bir bilgi işleme sistemi olarak tanımlanır. Yapay sinir ağları, insan beyninin özelliklerinden olan öğrenme yolu ile yeni bilgiler türetebilme, yeni bilgiler oluşturabilme ve keşfedebilme gibi yetenekleri herhangi bir yardım almadan otomatik olarak gerçekleştirmek amacı ile geliştirilen bilgisayar sistemleridir.

Yapay sinir ağları, olayların örneklerine bakmakta, onlardan ilgili olay hakkında genellemeler yapmakta, bilgiler toplamakta ve daha sonra hiç görmediği örnekler ile karışılışınca öğrendiği bilgileri kullanarak o örnekler hakkında karar verebilmektedir. 1990'lı yıllardan beri bilgisayarların öğrenmesini sağlayan Yapay Sinir Ağları teknolojisinde oldukça hızlı bir gelişme görüldü. Yapay sinir ağları, insan beyninin

özelliklerinden olan öğrenme yolu ile yeni bilgiler türetebilme, yeni bilgiler oluşturabilme ve keşfedebilme gibi yetenekleri herhangi bir yardım almadan otomatik olarak gerçekleştirmek amacı ile geliştirilen bilgisayar sistemleri olduklarından hem yeni gelişmelere neden oldular hem de nasıl çalıştığı bilinmeyen insan beyni hakkında yapılan araştırmalara da önemli katkılar sağladılar ve sağlamaktadırlar.

Başka bir bakış açısıyla Yapay Sinir Ağları teknolojisi insanlığın doğayı araştırma ve taklit etme çabalarının en son ürünlerinden bir tanesi olarak da yorumlanabilir. Önceleri temel tıp bilimlerinde insan beynindeki nöronların matematiksel modellenmesi çabalarıyla başlayan çalışmalar son yıllarda oldukça disipline bir hal almıştır. YSA bugün, fizik, matematik, elektrik ve bilgisayar mühendisliği vb. çok farklı bilim dallarında araştırma konusu haline gelmiş ve çeşitli meslek gruplarında çalışanlar, YSA'yı kendi uzmanlık alanlarına tanıtmışlardır. Böylece insan zekasına has görünen bazı kavramların sayısal olarak ifade edilebileceği ve böyle makinelerin insan zekasına şaşırtıcı derecede benzer yollarda öğrenme ve hatırlama işlemlerini yapabileceği görülmüştür.

Herhangi bir problemin çözümünü sağlayan bir algoritma geliştirilmiş ise geleneksel bilgisayar sistemleri, problemi çözmek için yeterli olmaktadır. Önemli olan problemin çözümünü veren bir formül olmadığı durumda bilgisayara problemi çözdürmektir. Bu zeka gerektiren bir fonksiyondur. Bu gibi durumlarda YSA örneklerle eğitilerek model önermeden problemi çözmektedir. Yapay sinir ağının geniş kapsamlı olarak kullanılmasının en önemli nedeni, klasik tekniklerle çözümü zor olan problemlerin çözümünde etkin rol oynamasıdır.

Ağın gizli katman sayısı ve bir katmanda bulunan nöron sayısı ne kadar çok ise ağ o kadar iyi öğrenir gibi bir kural yoktur. Gizli katman sayısı ve gizli nöron sayısı arttıkça işlem sayısı artmakta bu şekilde ağın öğrenme süresi uzamaktadır, yani ağ tasarlanırken mümkün olan en küçük ağ yapısı seçilmelidir. Ağın ideal yapısı deneme yanılma yöntemiyle bulunur. Bazı çalışmalarda önerilen ağ yapıları olmasına rağmen henüz kesin bir yöntem bulunmamaktadır.

YSA, kontrol çalışmalarında modelleme amacıyla kullanılmaktadır. Herhangi bir prosese ilişkin girdi ve çıktı verilerinin elde bulunduğu koşullarda, YSA modeli bu

veriler ile bir kere eğitildikten sonra eğitim aralığı içindeki farklı girdiler ile karşılaştığında da istenen çıktıları verebilmektedir. Bir başka deyişle tahmin yapabilmektedir.

Bu çalışma kapsamındaki araştırmada, 1.6 litrelik soğutma ceketli kesikli bir reaktörde, belirlenen işletim şartlarında reaktör sıcaklığının YSA temelli Model Öngörülü Kontrolü gerçekleştirilmiştir.

Bu doğrultuda;

- Prosesin dinamik özellikleri saptanmış, proses modeli YSA ile teorik ve deneysel olarak belirlenmiş,
- Elde edilen analitik model, teorik YSA modeli ve deneysel YSA modeli karşılaştırılmış,
- Kesikli tepkime kabının optimum işletim şartlarında, sistemde istenmeyen yük etkilerini ortadan kaldıran yapay sinir ağı temelli modele dayalı kontrol algoritması geliştirip, hem deneysel hem de teorik olarak uygulanmış,
- Ayrıca tepkime esnasında ölçülmesi zor olan monomer derişimini tahmin etmek için ayrı bir YSA modeli oluşturulmuş ve başarımı test edilmiştir.

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

Polimerizasyon ürününün belirlenen optimum şartlarda eldesi için gelişmiş kontrol yöntemlerine başvurulur. Bu kontrol yöntemleri ile prosesler, belli başlangıç koşulundan, son istenen şartlara ulaştırılarak ve işletim şartlarına etki eden istenmeyen yük etkilerini yok ederek istenen işletimde çalıştırılmaktadır Polimer üretiminde, etkin kontrollerin istendiği yerlerde modele dayalı kontrol sistemleri kullanılır. Doğrusal tahmini kontrolün uygulanması doğrusal olmayana göre daha basit ve kontrol özellikleri daha anlaşılabilir şekildedir. Ancak polimerizasyon reaksiyonlarının yüksek dereceden doğrusal olmama özelliğinden dolayı etkinliğin daha zayıf olması istenmeyen durumları ortaya çıkarır. Bu durum farklı işletim şartlarında farklı modeller ve özellikle parametrik olmayan YSA modelleri kullanılarak giderilebilir. Bugüne kadar doğrusal olmayan kontrol sistemlerinin polimerizasyon reaksiyonlarına uygulanması üzerine yapılan araştırmaların çoğu, teorik olarak gerçekleştirilmiştir. Bu konuda deneysel çalışma oldukça azdır.

Konu ile ilgili yapılan çalışmalar aşağıda verilmiştir.

Tan ve Cauwenberghe (1996) Tek Girdili – Tek Çıktılı bir proses için, YSA temelli Model Öngörülü bir kontrol stratejisi sunmuşlardır. YSA modelini matematiksel olarak ifade edip, optimizasyon işleminin ardından kontrol davranışını hesaplamak için bir formül geliştirmişlerdir. Buldukları stratejiyi Sürekli Karıştırılmalı Tepkime Kabı içinde gerçekleşen birinci derece ekzotermik bir reaksiyonun kontrolüne uygulamışlar, soğutma suyu akış hızını ayarlayarak reaktör sıcaklığını başarıyla kontrol etmişlerdir.

Hussain (1999) tarafından yapılan araştırmada YSA'nın Kimyasal Proses Kontrolü alanında kullanımı konusunda yapılmış 100 araştırmayı incelemiştir. Bu konuda yapılan araştırmalar hakkında genel bir fikir sahibi olmak ve YSA araştırmalarının gelecekte hangi mecrada ilerleyeceğini anlayabilmek açısından önemli olan araştırmada, incelenen 100 ayrı çalışma dört kategoride sınıflandırılmıştır:

- a) Öngörülü Kontrol Stratejilerinde YSA'nın uygulandığı çalışmalar
- b) Ters-model tabanlı Kontrol Stratejilerinde YSA'nın uygulandığı çalışmalar
- c) Adaptif Kontrol Stratejilerinde YSA'nın uygulandığı çalışmalar

d) YSA tabanlı kontrol metodlarının kullanıldığı deneysel çalışmalar.

Ulaşılan diğer sonuçlar ise şunlardır:

YSA'nın kimyasal proses kontrolüne uygulandığı hem deneysel hem de benzetim çalışmaları yayılarak sürekli artmaktadır. İyi bilinen doğrusal olmayan kontrol metotları ile eklemlenebilme anlamında YSA'lar beceriklidir. Sigmoidal ya da Hiperbolik aktivasyon fonksiyonları içeren çok katmanlı ileri beslemeli YSA'lar, hala en yaygın kullanılan ağ tipidir. Başka bir çok ağ tipi ve aktivasyon fonksiyonu olduğu halde bunların kullanılması, bu ağların geniş bir alanda sistem tanımlama ve kontrol kabiliyetindeki başarısını göstermektedir. Bildirilen deneysel çalışmaların çoğu laboratuvar ölçekli çalışmalardır. Az sayıda pilot ölçekli ve çok az bildirilen fakat sonuçları yayımlanmamış endüstriyel ölçekli çalışma mevcuttur.

Martins ve Coelho (2000), PID kontrole ileri beslemeli YSA'yı uygulamış ve elde ettikleri sonuçlarla, PID'nin geleneksel kontrol yapısında büyük değişiklikler yapmadan da performansın artırılabilceğini göstermişlerdir. YSA'nın kontrol değişkeninin gelecekte alacağı değerleri tahmin eden bir proses modeli olarak davrandığını göstermişler; YSA'yı PID kontrol algoritmasında tamamlayıcı bir araç olarak kullanmışlardır.

Tian vd. (2002) kendini yenileyen YSA ile kesikli emülsiyon polimerizasyonu reaktörünü modellemiş ve optimal bir kontrol stratejisi ortaya koymuşlardır. Son ürün kalitesinin esas ilgi odağı olduğu kesikli proseslerin modellenmesinde, kendini yenileyen YSA'nın uzun vadeli tahminlerde tutarlı sonuç verdiğini belirtmişlerdir. Elde ettikleri benzetim sonuçları doğrultusunda, önerdikleri optimal kontrol stratejisinin üretimin geliştirilmesine yaradığını belirtmişlerdir.

Curtenau ve Petrila'nın (2006) çalışmasında çeşitli işletim koşullarında (sıcaklık, başlatıcı derişimi vb.) polistiren reaktörünün kinetik modelinden veri alınarak YSA eğitilmiştir. Daha sonra modele önceden karşılaşmadığı girdi değişkenleri verilmiş ve YSA modelinin çıktıları ile kinetik modelin çıktıları karşılaştırılmıştır. YSA Modelinin sistemi başarıyla temsil ettiği sonucuna varılmıştır. Bu çalışmada girdi değişkenleri olarak sıcaklık, başlatıcı başlangıç derişimi, başlangıç dönüşümü ve zaman alınmış;

çıktı değişkenleri ise monomer dönüşümü, başlatıcı derişimi, polimerleşme derecesi, ağırlıkça ortalama polimerleşme derecesi tahmin edilmiştir.

Fernandes ve Lona (2005) YSA'yı seçmek ve eğitmek için işe yarayabilecek basit ve pratik bilgileri içeren bir rehber oluşturmayı düşünmüşlerdir. Eğitim için kullanılacak verilerin ilgilenilen alanın tamamına yayılmış olması ve mümkün olduğu kadar çok farklı değerler almaları gerektiğini vurgulamışlar. Verilerin normalize edilmesinin öneminden bahsetmişlerdir. Eğitim esnasında 'ezberleme'den (overfitting) kaçınmak için birkaç eğitimi durdurma kriteri önermişlerdir:

- a) Önceden belirlenmiş döngü (epoch) sayısı
- b) Hata fonksiyonunun önceden belirlenmiş bir değere ulaşması
- c) Hata fonksiyonunun gradienti'nin önceden belirlenmiş bir değere ulaşması
- d) Cross-Validation hatasının en küçük değere ulaşması

YSA'nın başarımının düşük olduğu bir çok çalışmada başarısızlığın nedeninin ya uygun olmayan eğitimden ya yetersiz gizli katman ve nöronlardan ya da girdiler ve çıktılar arasında belirlenme ilişkisi olmamasından kaynaklandığını savunmuşlar; en iyi YSA mimarisinin seçiminde birçok ağı eğitip en iyisini seçmenin yerine birleştirilmiş YSA'ların kullanılabileceğini belirtmişlerdir. Birleştirilmiş ağı polistiren reaktörünü modellemek için kullanmış ve en iyi sonucu elde ettiklerini belirtmişler. Her bir ağıdan elde edilen sonuçlar ile birleştirilmiş ağıdan elde edilen sonuçları karşılaştırmışlar, birleştirilmiş ağı, kendisini oluşturan ağların hatalarının hepsinden daha düşük hata verebileceğini ispatlamışlardır. Aynı çalışmada araştırmacılar eğitim setinin büyüklüğünün YSA'nın başarımına etkisini de vinil asetat polimerizasyonu örneğinde incelemişlerdir. Eğitim setinin büyümesinin belirli bir sayıya kadar başarımı artırdığını ancak bu noktadan sonra daha fazla veri ile ağı eğitmenin başarım artışı sağlamadığını belirtmişler. (Girdi sayısı x Çıktı sayısı x 20) adet verinin kullanılmasını tavsiye etmişlerdir.

Mjalli ve Al-Asheh (2005) etanolün mayalanma prosesinin, model esaslı tahmine dayalı kontrol algoritmasını YSA ile birleştirmiş, sıcaklık ve derişim kontrolünü başarı ile sağlamışlardır. Eğitim ve test için veriler kütle ve enerji denklemlerinden elde

edilmiştir. Kontrolün sağlanması için bir amaç fonksiyonu önerilmiş ve bu amaç fonksiyonunu minimum yapan ayar değişkenleri bulunmuştur.

Yüceer vd. (2006) sürekli karıştırmalı tank reaktörde çıkış derişiminin YSA temelli kontrolünü incelemiştir. Kontrol, soğutma suyu akış hızı ayarlanarak sağlanmıştır. Sistemin doğrusal olmama yapısından dolayı YSA Öngörmeli kontrol edici ve NARMA-L2 kontrol edici yapıları uygulanmıştır. Elde edilen sonuçlar PID kontrol edici ile kıyaslandığında YSA temelli algoritmaların daha iyi sonuç verdiği saptanmıştır.

Akesson ve Toivonen (2006), doğrusal olmayan sistemlerin YSA ile kontrolünü incelemiştir. YSA kontrol edici, Model Öngörülü Kontrol maliyet fonksiyonunu belirli sayıda eğitim verisi kullanarak minimize etmek suretiyle tasarlanmıştır. Elde edilen bulgular sonucunda YSA temelli kontrol edicinin diğer Model Öngörülü Kontrol edicilere göre işlemci eforunu gözle görülür bir biçimde düşürdüğü bildirilmiştir. Bununla beraber, ağı eğitimi aşamasında sarf edilen işlemsel eforun kontrol ufkunun uzunluğuna değil YSA'nın yapısının karmaşıklığına bağlı olduğu tespit edilmiştir. Dolayısıyla Model Öngörülü Deneticiye göre daha uzun kontrol ufkuna sahip kontrol edicilerin tasarlanmasının uygun hale geldiği belirtilmiştir.

Nagy (2007), YSA Model Öngörülü Denetimi, bir mayalanma biyoreaktörüne uygulamıştır. Tepkime kabının sıcaklığı, soğutma sıvısının akış hızı ile kontrol edilmiştir. Elde ettiği sonuçları Doğrusal Model Öngörülü Denetici ve PID denetici ile elde ettiği sonuçlarla karşılaştırmış ve YSA Model Öngörülü Deneticinin daha iyi sonuç verdiğini saptamıştır. Çalışmada ayrıca kullanılacak YSA için en iyi mimari yapıyı önceden belirlemek amacıyla 'Optimal Brain Surgeon' adı verilen bir yöntem kullanılmıştır. Bu yöntem, ağı ezberlemesini engellemek için optimum ağı yapısını, gereksiz ağırlıkları ağdan çıkarmak suretiyle bulmaktadır. Bir ağırlık ağdan çıkartıldığında hata kriterinin değişimini tahmin eden bir fonksiyon tanımlanmış ve bu fonksiyon tüm ağı üzerinde çalıştırılarak gereksiz ağırlıklar yok edilmiştir. Diğer araştırmalarda genellikle deneme yanılma metoduyla bulunan YSA mimarisi, adı geçen yöntem ile bulunarak ezberlemenin gerçekleşmesi önlenmiştir.

Atasoy vd. (2007) akrilonitril polimerizasyon sürecine NARMA-L2 (Nonlinear Auto Regressive Moving Average) ve Model Öngörülü Kontrolü teorik olarak MATLAB ile uygulamışlardır. Ayar değişkeni reaktöre giren sodyum bisülfat derişimi, kontrol değişkeni ise polimerin molekül ağırlığıdır. Elde ettikleri sonuçlara göre model öngörülü kontrolün daha uzun işlem zamanı gerektirdiğini saptamışlardır.

Ekpo ve Mujtaba (2008) metil metakrilat'ın serbest radikalik polimerizasyonunun gerçekleştiği kesikli tepkime kabında işletim şartları optimizasyonu ve YSA tabanlı kontrol çalışmışlardır. Optimizasyonda hedef dönüşüm %60, %75 ve %90 olmak üzere her biri için 150000 g/mol ağırlığında polimer elde etmek amaçlanmıştır. Üç farklı hedef için minimum zaman optimizasyonu yapılmış, optimum sıcaklık profili ve optimum başlatıcı başlangıç derişimi elde edilmiştir. Araştırmacılar YSA tabanlı Jenerik Model Kontrol (GMC-NN) ve YSA tabanlı Ters-model Kontrol (IMBC) algoritmalarının kesikli polimerizasyon tepkimelerine daha önce uygulanmadığını belirterek bu uygulamayı gerçekleştirmişlerdir. Elde ettikleri sonuçlarda iki tip kontrol edicinin de set noktası takibinde başarılı olmakla beraber YSA tabanlı Jenerik Model kontrol edicinin daha yakın takip ettiğini ve son ürün özelliklerinin bu algoritma kullanıldığında daha iyi olduğunu bildirmişlerdir. %60 dönüşüm ve 150,000 g/mol polimer amaçlanan seçenekte elde edilen sonuçlar; GMC-NN için %59.84 ve 148,828 g/mol, IMBC için %59.1 ve 148,556 g/mol olarak bildirilmiştir.

3. YAPAY SİNİR AĞLARI

3.1 Yapay Sinir Ağlarının Tanımı

Yapay Zeka disiplini; insanların, bilgisayarlardan daha iyi yaptıkları işleri bilgisayarların yapabilmesi için çalışan bilimsel disiplindir. İnsanların düşünüş süreci ve bazı doğal süreçler (örn. Evrim) ele alınarak bu süreçleri çeşitli makineler kullanarak taklit etmeye dayanır. Yapay Zeka teknikleri başlıca dört gruptan oluşur; Yapay Sinir Ağları, Bulanık Mantık, Uzman Sistemler ve Genetik Algoritma.

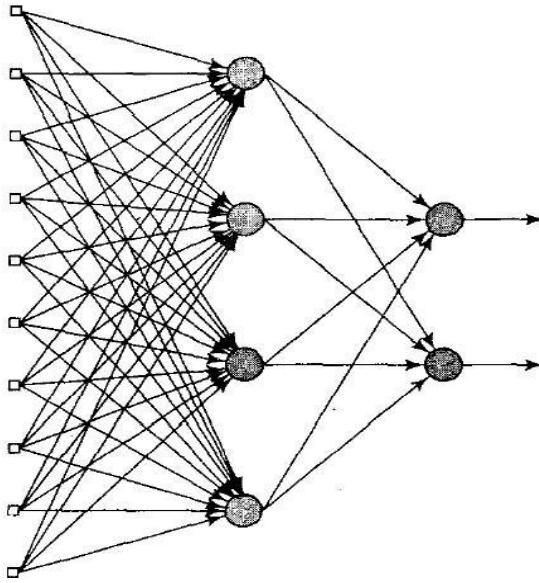
Yapay sinir ağları, insan beyninin özelliklerinden olan öğrenme yolu ile yeni bilgiler türetebilme, yeni bilgiler oluşturabilme ve keşfedebilme gibi yetenekleri herhangi bir yardım almadan otomatik olarak gerçekleştirmek amacı ile geliştirilen bilgisayar sistemleridir. Bu yetenekleri geleneksel programlama yöntemleri ile gerçekleştirmek oldukça zor veya mümkün değildir. O nedenle, yapay sinir ağlarının, programlanması çok zor veya mümkün olmayan olaylar için geliştirilmiş uyarlanabilir bilgi işleme ile ilgilenen bir bilgisayar bilim dalı olduğu söylenebilir (Öztemel, 2003).

Yapay Sinir Ağları (YSA), basit biyolojik sinir sisteminin çalışma şeklinin benzetimini yapmak için tasarlanan programlardır. Benzetimi yapılan sistemler sinir hücreleri (nöronlar) içerirler ve bu nöronlar çeşitli şekillerde birbirlerine bağlanarak ağı oluştururlar. Bu ağlar öğrenme, hafızaya alma ve veriler arasındaki ilişkiyi ortaya çıkarma yeteneğine sahiptirler. Diğer bir ifadeyle, YSA'lar, normalde bir insanın düşünme ve gözlemlemeye yönelik doğal yeteneklerini gerektiren problemlere çözüm üretmektedir. Bir insanın, düşünme ve gözlemleme yeteneklerini gerektiren problemlere yönelik çözümler üretebilmesinin temel sebebi ise insan beyninin ve dolayısıyla insanın sahip olduğu yaşayarak veya deneyerek öğrenme yeteneğidir.

Biyolojik sistemlerde öğrenme, nöronlar arasındaki sinaptik bağlantıların ayarlanması ile olur. Yani, insanlar doğumlarından itibaren bir yaşayarak öğrenme süreci içerisine girerler. Bu süreç içinde beyin sürekli bir gelişme göstermektedir. Yaşayıp tecrübe ettikçe sinaptik bağlantılar ayarlanır ve hatta yeni bağlantılar oluşur. Bu sayede öğrenme gerçekleşir. Bu durum YSA için de geçerlidir. Öğrenme, eğitme yoluyla örnekler kullanarak olur; başka bir deyişle, gerçekleşme girdi/çıktı verilerinin işlenmesiyle, yani

eğitme algoritmasının bu verileri kullanarak bağlantı ağırlıklarını bir yakınsama sağlanana kadar, tekrar tekrar ayarlamasıyla olur.

YSA'lar, ağırlıklandırılmış şekilde birbirlerine bağlanmış bir çok işlem elemanlarından (nöronlar) oluşan matematiksel sistemlerdir. Bir işlem elemanı, aslında sık sık transfer veya aktivasyon fonksiyonu olarak anılan bir denklemdir. Bu işlem elemanı, diğer nöronlardan sinyalleri alır; bunları birleştirir, dönüştürür ve sayısal bir sonuç ortaya çıkartır. Genelde, işlem elemanları kabaca gerçek nöronlara karşılık gelirler ve bir ağ içinde birbirlerine bağlanırlar; bu yapı da sinir ağlarını oluşturmaktadır.



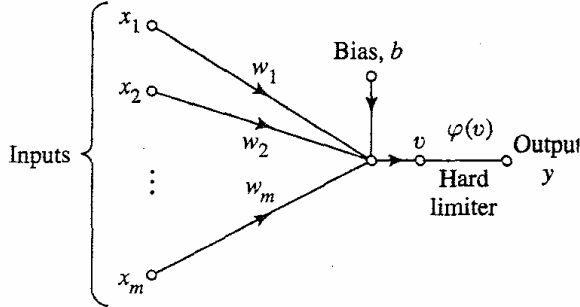
Şekil 3.1 Yapay Sinir Ağı

Şekil 3.1’de görüldüğü gibi çoğu YSA’da, benzer karakteristiğe sahip nöronlar tabakalar halinde yapılandırılırlar ve transfer fonksiyonları eş zamanlı olarak çalıştırılırlar. Hemen hemen tüm ağlar, veri alan nöronlara ve çıktı üreten nöronlara sahiptirler.

3.2 Yapay Sinir Ağlarının Tarihçesi

1940’lardan itibaren YSA üzerinde çalışmalar başlamıştır. İlk YSA modeli, bir sinir hekimi ile bir matematikçi tarafından gerçekleştirilmiştir (McCulloch and Pitts, 1943). İki bilim adamı insan beyninin hesaplama yeteneğinden esinlenerek, elektrik devreleriyle basit bir sinir ağını modellemişlerdir. “Organization of Behavior” isimli kitapta, öğrenme ile ilgili temel teori ele alınmıştır (Hebb, 1949). 1957 yılında Frank

Rosentblatt'ın Perceptron'u gerçekleştirmesinden sonra yapay sinir ağı alanındaki gelişmeler hızlanmıştır.



Şekil 3.2 Perceptron

Perceptron (Şekil 3.2), beyin işlevlerini modelleyebilmek amacıyla yapılan çalışmalar neticesinde ortaya çıkan tek katmanlı eğitilebilen ve tek çıkışa sahip olan yapay sinir ağıdır.

1959'da ADALINE ve MADALINE diye adlandırılan ağ modelleri geliştirildi (Widrow and Hoff, 1960). MADALINE, telefon hatlarında oluşan yankıları yok eden bir uyarlanabilir süzgeç olarak kullanılmış, gerçek dünya sorunlarına uygulanmış olan ilk sinir ağıdır ve hala kullanılmaktadır.

Minsky ve Papert (1969) Perceptron'un yetersizliğini görmüş ve XOR problemini* çözemediğini ispatlamıştır. Bunun için iki katmanlı ileri beslemeli ağların kullanılabileceğini ileri sürmüşler ve tek katmanlı ağlardaki birçok sınırlamayı ortadan kaldırdığını göstermişlerdir. Fakat gizli katmanların ağırlıklarının nasıl değiştirileceği konusunda bir yöntem önerememişlerdir. Bu soruna Rumelhart ve arkadaşları (1986) geri yayılım yöntemi ile bir çözüm getirmişlerdir.

Bu erken başarılar, insanların sinir ağlarının potansiyelini abartması sonucunu doğurmuştur. Abartılı beklentilerin gerçekleştirilememesi bu beklentileri hayal kırıklığına dönüştürmüştür. Aynı zamanda bazı bilim kurgu yazarlarının 'düşünen makinelerin' insanları nasıl etkileyeceğini ele almalarına yol açmıştır. Bazı yazarlar

* XOR problemi kısaca tanımlayacak olursak, sıfırlar ve birlerin girdi ve çıktı değerleri olduğu iki girdili bir çıktılı problemde girdiler birbiri ile aynı olduğunda sıfır, birbirinden farklı olduğunda bir çıktısını vermesini istediğimiz bir ağı tasarlanması problemidir. (<http://gseacademic.harvard.edu/~elsheish/hidden.htm>, 2009).

korkunç bilgisayarların yaratılacağı hakkında abartılı kitaplar yazmışlardır. Bu yersiz ve abartılı iddialar YSA arařtırmalarının 80'lerin bařına kadar yavařlamasına yol amıřtır.

80'li yıllar sinirsel hesaplama alıřmaları iin bir atılım dnemi olmuřtur. Hopfield, 1982 yılında ağıların nemli sınıflarının matematik temellerini retmiřtir. 1984'te Kohonen, danıřmansız ğrenen ağıları geliřtirmiřtir. 1986'da Rumelhart ve McClelland karmařık ve ok katmanlı ağılar iin geri yayılımlı ğrenme algoritmasını ortaya koymuřtur.

1987 yılında Amerikan Elektrik Elektronik Mhendisliğı Enstits tarafından sinir ağılarını konu alan ilk uluslar arası konferans 1800' ařkın katılımcıyla gerekleřtirilmiřtir (Elmas, 2003).

1990'da Hecht-Nielsen  katmanlı ileri beslemeli bir YSA'nın evrensel fonksiyon yaklařtırma yeteneğini ispatlamıřlardır.

Bugn, neredeyse btn bilimsel disiplinlerde yapılan arařtırmalarda YSA'nın kullanımı artarak srmektedir.

3.3 Yapay Sinir Ağıının Uygulama Alanları

Yapay sinir ağıları bařlıca; Sınıflandırma, Modelleme ve Tahmin uygulamaları olmak zere, pek ok alanda kullanılmaktadır. Bařarılı uygulamalar incelendiğinde, YSA'ların ok boyutlu, grltl, karmařık, kesin olmayan, eksik, kusurlu, hata olasılığı yksek sensr verilerinin olması ve problemi zmek iin matematiksel modelin ve algoritmaların bulunmadığı, sadece rneklerin var olduğı durumlarda yaygın olarak kullanıldıkları grlmektedir. Bu amala geliřtirilmiř ağılar genellikle řu fonksiyonları gerekleřtirmektedirler (ztemel, 2003);

- Muhtemel fonksiyon kestirimleri
- Sınıflandırma
- İliřkilendirme veya rnt eřleřtirme
- Zaman serileri analizleri
- Sinyal filtreleme
- Veri sıkıřtırma

- Örüntü tanıma
- Doğrusal olmayan sinyal işleme
- Doğrusal olmayan sistem modelleme
- Optimizasyon
- Kontrol

YSA'lar pek çok sektörde değişik uygulama alanları bulmuştur. Bunlardan bazıları;

Uzay: uçuş simülasyonları, otomatik pilot uygulamaları, komponentlerin hata denetimleri vs.

Otomotiv: otomatik yol izleme, rehber, garanti aktivite analizi, yol koşullarına göre sürüş analizi vs.

Bankacılık: kredi uygulamaları geliştirilmesi, müşteri analizi ve kredi müracaat değerlendirilmesi, bütçe yatırım tahminleri vs.

Savunma: silah yönlendirme, hedef seçme, radar, sensör sonar sistemleri, sinyal işleme, görüntü işleme vs.

Elektronik: kod sırası öngörüsü, çip bozulma analizi, non-lineer modelleme vs.

Eğlence: animasyonlar, özel efektler, pazarlama öngörüsü vs.

Finans: kıymet biçme, pazar performans analizi, bütçe kestirimi, hedef belirleme vs.

Sigortacılık: ürün optimizasyonu, uygulama politikası geliştirme vs.

Üretim: üretim işlem kontrolü, ürün dizaynı, makina yıpranmalarının tespiti, dayanıklılık analizi, kalite kontrolü, iş çizelgeleri hazırlanması vs.

Sağlık: göğüs kanseri erken teşhis ve tedavisi, EEG, ECG, MR, kalite artırımı, ilaç etkileri analizi, kan analizi sınıflandırma, kalp krizi erken teşhis ve tedavisi vs.

Petrokimya: arama, verim analizi vs.

Robotik: yörünge kontrol, forklift robotları, görsel sistemler, uzaktan kumandalı sistemler, optimum rota belirleme vs.

Dil: sözcük tanıma, yazı ve konuşma çevrimi, dil tercüme vs.

Telekomünikasyon: görüntü ve data karşılaştırma, filtreleme, eko ve gürültü sönümlendirilmesi, ses ve görüntü işleme, trafik yoğunluğunun kontrolü ve anahtarlama vs.

Güvenlik: parmak izi tanıma, kredi kartı hileleri saptama, retina tarama, yüz eşleştirme vs.

Örnekler çoğaltılabilir. Görüldüğü gibi YSA'lar günlük hayatımızda farkında olmadığımız pek çok alanda kullanılmaktadır. Gün geçtikçe uygulama alanları genişlemekte ve gelişmektedir. Kimya mühendisliği ve kontrol mühendisliği alanlarındaki uygulamaları ise özetle aşağıdaki verilmiştir.

Kimya Mühendisliği: Kimyasal reaktör seçimi, dinamik işlemlerde hata belirlenmesi, endüstriyel polimerizasyonda eritme akış indisi tahmini, endüstriyel mayalama işleminin modellenmesi, polimerleşme tepkimelerinin modellenmesi , biyokimyasal işlemlerde mikrobik konsantrasyonların tahmini, ters modelleme yoluyla tepkimelerin optimum işletim şartlarının belirlenmesi.

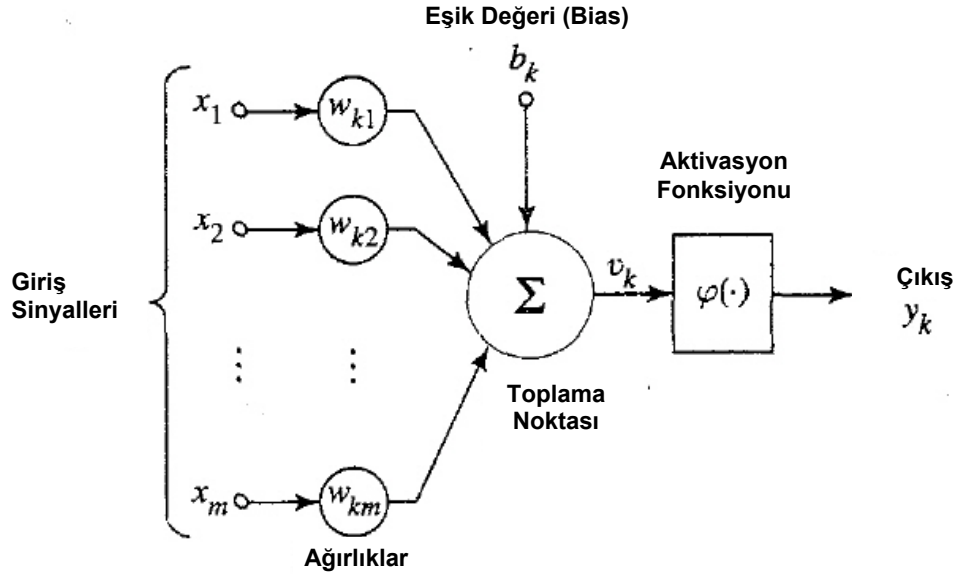
Sistem ve Kontrol Mühendisliği: Esnek kollu robotun kontrolü, bir model helikopterin havada kontrolü, çok değişkenli robotun yörünge koordinasyonu, iki sıvı tank sisteminin akış seviye kontrolü, anestezi derinliği kontrolü ve ölçülmesi, bir robot için optimal yolun bulunması, banyo suyu sıcaklığının kontrolü, endüstriyel robot kontrolü, sistem tanımlama gibi birçok alanda uygulanmıştır.

3.4 Yapay Sinir Ağının Yapısı

YSA'nın ana ögesi olan matematiksel fonksiyon, ağın mimarisi tarafından şekillendirilir. Daha açık bir şekilde ifade etmek gerekirse, fonksiyonun temel yapısını ağırlıkların büyüklüğü ve işlem elemanlarının işlem şekli belirler. YSA'ların davranışları, yani girdi veriyi çıktı veriye nasıl ilişkilendirdikleri, ilk olarak nöronların

transfer fonksiyonlarından, nasıl birbirlerine bağlandıklarından ve bu bağlantıların ağırlıklarından etkilenir.

Yapay Sinir Ağının temel işlem birimi yapay nörondur (Şekil 3.3).



Şekil 3.3 Yapay Nöron

Ağırlıklar: Her bir bağlantının ağırlığı vardır. Ağırlıklar girdilerin işlem elemanı üzerinde etkisini belirler, sabit veya değişken olabilirler. Değişken değer alan ağırlıklar, öğrenme sırasında sürekli olarak değişerek ağırlık girdi ve çıktı arasındaki ilişkiyi yakalaması için çalışır. Yani bu ağırlıklar öğrenme sırasında optimize edilir. Ağırlık büyüdükçe bir işlem elemanının diğeri üzerinde etkisi artar. Ağırlığın sıfır olması hiçbir etkinin olmaması demektir (Elmas, 2003).

Toplama Noktası: İşlem elemanlarından gelen veriyi birleştirme görevini yapar. Yani bir nörona gelen net girdiyi hesaplayan fonksiyondur.

$$Net_i = \sum_j w_{ij} I_j \quad (3.1)$$

Burada Net_i işlem elemanına giren net girdi, I_j işlem elemanının çıktısı, w_{ij} i ve j işlem elemanları arasındaki bağlantının ağırlığıdır. Denklem 3.1’de verilen fonksiyon bu çalışmada kullanılan fonksiyondur. Bununla beraber yapay sinir ağlarını genel anlamda inceleyen kaynaklarda başka birleştirme fonksiyonlarının da yer yer kullanıldığı bildirilmiştir. Örneğin;

$$Net_i = \prod w_{ij} I_j \quad (3.2)$$

$$Net_i = Max(w_{ij} I_j) \quad (3.3)$$

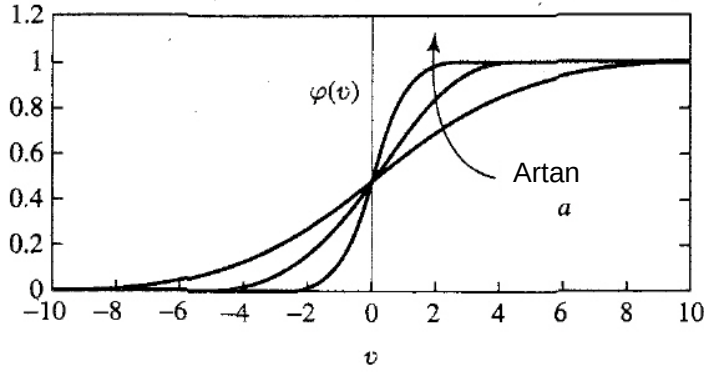
$$Net_i = Min(w_{ij} I_j) \quad (3.4)$$

$$Net_i = \sum_j Sgn(w_{ij} I_j) \quad (3.5)$$

$$Net_i = Net_{eski} + \sum_j w_{ij} I_j \quad (3.6)$$

Çarpım (3.2), maksimum (3.3), minimum (3.4), çoğunluk (3.5) ve kümülatif toplam (3.6) gibi fonksiyonlar da birleştirme fonksiyonu olarak kimi zaman kullanılmaktadır.

Aktivasyon Fonksiyonu: Birleşme fonksiyonu tarafından belirlenen net girdiyi alarak işlem elemanının çıkışını belirleyen fonksiyondur. Türevi alınabilen ve sürekli bir fonksiyon olması tercih edilir. Çünkü eğitim aşamasında fonksiyonun türevi alınmaktadır. Çeşitli uygulamalarda farklı aktivasyon fonksiyonları kullanılmakla beraber, kimya mühendisliğindeki reaktör modelleme problemlerinin çoğunda kullanılan fonksiyonlar sigmoid tipteki fonksiyonlardır.



Şekil 3.4 Sigmoid Fonksiyonu

$$\varphi(v) = \frac{1}{1 + \exp(-av)} \quad (3.7)$$

Tıpkı toplama noktası fonksiyonlarında olduğu gibi aktivasyon fonksiyonlarında da değişik tipte fonksiyonlar problemin yapısına göre seçilir. Sigmoid fonksiyonunun dışında lineer, sinüzoidal, hiperbolik tanjant gibi fonksiyonlar problemin yapısına göre seçilerek kullanılabilir.

Eşik Değeri: Bias sabit aktivasyon değeri ile ilgili özel işlem elemanıdır. Aktivasyon fonksiyonun orijini dengeye getirmeye çalışır. Eşik değeri olarak da adlandırılır. Yapay Sinir Ağı – Gerçek Sinir Ağı analojisinde, bir sinir hücresinin gelen etkiye tepki verebilmesi için ihtiyaç duyduğu minimum eşik değerini nörona sağlayan bir eleman olarak düşünülebilir.

3.5 Yapay Sinir Ağlarında Öğrenme

Klasik bilgi işleme yöntemlerinin çoğu programlama yoluyla hesaplamaya dayanmaktadır. Yani bir problemin çözümü için probleme yönelik bir algoritma geliştirilmelidir. Bunun yanında bu yöntemler tam tanımlı olmayan problemleri çözemez. Yapay sinir ağları ise belirli bir probleme göre programlanmadığı halde o problemi çözmeyi öğrenebilir.

Genel anlamda öğrenme, sinir ağının, giriş uyarıcılarını kullanarak kendini istenen sonuçları vermek üzere ayarlamasıdır. İşlem elemanı ve ağ yapısı tasarlandıktan sonra, YSA'nın öğrenme işlemi başlatılabilir. Öğrenme hemen hemen bütün yapay sinir

ağlarının temelidir. Öğrenme, ağdaki nöronların değiştirilmesi ile değil, nöronlar arasındaki bağlantı ağırlıklarının değiştirilmesi ile sağlanır. Tek bir nöronun çıkışının nasıl belirlendiği göz önüne alındığında; nöronun aktivasyon fonksiyonunun sabit olması koşuluyla çıkışını, yalnızca giden işaretin ve nörona giriş bağlantı ağırlıklarının belirlediği bilinmektedir. Nöronun gelen işarete doğru cevap vermesinde ve performansının artırılmasında en önemli elemanlar bağlantı ağırlıklarıdır.

Öğrenme yöntemleri başlıca iki başlıkta ele alınabilir:

Danışmanlı Öğrenme: YSA'da gerçek çıkış istenen çıkış ile kıyaslanır. Rasgele değişen ağırlıklar ağ tarafından öyle ayarlanır ki, bir sonraki döngüde gerçek çıkış ile istenen çıkış arasındaki fark azalsın. Öğrenme yöntemi, bütün işleme elemanlarının anlık hatalarının en aza indirmeye çalışır. Bu hata azaltma işlemi, kabul edilebilir doğruluğa ulaşana kadar ağırlıklar devamlı olarak derlenir.

Danışmansız Öğrenme: Danışmansız öğrenmede sistemin doğru çıkış hakkında bilgisi yoktur ve girişlere göre kendi kendisini örnekler. Danışmansız olarak eğitilebilen ağlar istenen ya da hedef çıkış olmadan giriş bilgilerinin özelliklerine göre ağırlık değerlerini ayarlar. Danışmansız öğrenmeye, Hebbian öğrenme, Grossberg öğrenme, Kohonen'in özörgütlemeli harita ağı örnek olarak verilebilir.

Bu çalışmada ağı eğitmek için danışmanlı öğrenme tekniklerinden biri olan geri yayımlı öğrenme algoritmalarından Levenberg-Marquardt yöntemi kullanılmıştır.

3.6 Levenberg-Marquardt Algoritması

Bolat ve Kalenderli'nin (2003) çalışmasında Levenberg-Marquardt algoritması şu şekilde açıklanmaktadır. Geriye yayılım algoritması, yapay sinir ağlarında en çok kullanılan algoritmadır. Geriye yayılım öğrenmesi sırasında ağ, her giriş örüntüsünü, çıkış nöronlarında sonuç üretmek üzere gizli katmanlardaki nöronlardan geçirir. Daha sonra çıkış katmanındaki hataları bulabilmek için, beklenen sonuçla, elde edilen sonuç karşılaştırılır. Bundan sonra, çıkış hatalarının türevi çıkış katmanından geriye doğru gizli katmanlara geçirilir. Hata değerleri bulunduğundan sonra, nöronlar kendi hatalarını azaltmak için ağırlıklarını ayarlar. Ağırlık değiştirme denklemleri, ağdaki performans fonksiyonunu en küçük yapacak şekilde düzenlenir.

İleri beslemeli ağırlarda kullanılan öğrenme algoritmaları, performans fonksiyonunu en küçük yapacak ağırlıkları ayarlayabilmek için, performans fonksiyonunun gradyenini kullanırlar. Geriye yayılım algoritması da, ağ boyunca gradyen hesaplamalarını geriye doğru yapar. En basit geriye yayılım öğrenme algoritması gradyen azalması algoritmasıdır. Bu algortmada ağırlıklar, performans fonksiyonunun azalması yönünde ayarlanır. Fakat bu yöntem, pek çok problem için çok yavaş kalmaktadır. Bu algortmadan daha hızlı, daha yüksek performanslı algortmalar da vardır.

Hızlı algortmalar genel olarak iki kategoriye ayrılabilir. İlk kategorideki algortmalar, deneme yanılma tekniklerini kullanarak, standart gradyen azalması (steepest descent) yönteminden daha iyi sonuçlar verebilir. Deneme-yanılma işlemlerini kullanan geriye yayılım algortmaları; momentum terimli geriye yayılım, öğrenme hızı değişen geriye yayılım ve esnek geriye yayılım algortmalarıdır. Hızlı algortmaların ikinci kategorisindeki algortmalar, standart sayısal optimizasyon yöntemlerini kullanır. Bu algortmalar; eşlenik gradyen öğrenme algortması, Newton öğrenme algortmaları ve Levenberg - Marquardt öğrenme algortmasıdır.

Öğrenme algortmaları, kendisinden önce geliştirilen algortmalara alternatif olarak ortaya çıkmıştır ve önceki algortmaların iyi yönlerini geliştirip, kötü yönlerini azaltmaya yönelmiştir. Levenberg - Marquardt algortması da, Newton ve Gradyen Azalması algortmalarının en iyi özelliklerinden oluşur ve kısıtlamalarını ortadan kaldırır.

Eşlenik gradyen öğrenme algortmasına alternatif olarak sunulan Newton yöntemlerinde, temel adım Hessian matrisini elde etmektir. Hessian matrisi, performans fonksiyonunun ağırlıklara göre ikinci dereceden türevlerinden oluşan bir matristir. Hessian matrisi, ağırlık uzayının farklı doğrultularındaki gradyen değişimini gösterir.

$$H(n) = \frac{\partial^2 E(n)}{\partial w^2(n-1)} \quad (3.8)$$

Burada H Hessian matrisi, E performans fonksiyonu, w ağırlığın sinaptik ağırlığıdır. Performans fonksiyonu, duruma göre toplam ani hata veya ortalama karesel hata olarak alınabilir. İleri beslemeli ağların çoğunda performans fonksiyonu olarak, ortalama karesel hata kullanılmaktadır.

$$E(n) = E_{ort}(n) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \sum_{j \in C} e_j^2(n) \quad (3.9)$$

Burada N eğitim kümesindeki toplam örüntü sayısını, e_j hata işaretini, C ağın çıkış katmanındaki bütün nöronları içeren kümeyi göstermektedir. d_j istenen değer, y_j ağın çıkışı olmak üzere hata işareti,

$$e_j(n) = d_j(n) - y_j(n) \quad (3.10)$$

olarak bulunabilir. Hessian matrisi hesaplandıktan sonra, tersi bulunarak ağırlıklar yenilenebilir. Ancak Hessian matrisi çok karmaşık ve ileri beslemeli bir yapay sinir ağı için hesaplanması zor bir matristir. Newton yöntemlerinin içinde, ikinci dereceden türevlerin hesaplanmadan işlem yapılan bir sınıf vardır. Bu sınıftaki yöntemler, quasi - Newton yöntemleri olarak adlandırılırlar. Quasi - Newton yöntemleri, algoritmanın her iterasyonunda, Hessian matrisinin yaklaşık bir şeklini kullanır.

Levenberg - Marquardt algoritması da quasi - Newton yöntemleri gibi, Hessian matrisinin yaklaşık değerini kullanır. Levenberg - Marquardt algoritması için Hessian matrisinin yaklaşık değeri şu şekilde bulunabilir:

$$H(n) = J^T(n)J(n) + \mu I \quad (3.11)$$

(3.11) denklemdeki μ Marquardt parametresi, I ise birim matristir. Burada J matrisi, Jakobien matrisi olarak adlandırılır ve ağ hatalarının ağırlıklara göre birinci türevlerinden oluşur:

$$J(n) = \frac{\partial e(n)}{\partial w(n-1)} \quad (3.12)$$

(3.12) denkleminde e, ağ hataları vektörüdür. Jakobien matrisi, hesaplamada Hessian matrisinden daha kolay olduğu için tercih edilir. Ağın gradyeni,

$$g(n) = J^T(n)e(n) \quad (3.13)$$

olarak hesaplanır ve ağırlıklar (3.14) denklemine göre değiştirilir:

$$w(n+1) = w(n) - [H(n)]^{-1} g(n) \quad (3.14)$$

Marquardt parametresi, μ , skaler bir sayıdır. Eğer μ sıfırsa, bu yöntem yaklaşık Hessian matrisini kullanan Newton algoritması; eğer μ büyük bir sayı ise, küçük adımlı gradyen azalması yöntemi haline gelir. Newton yöntemleri, en küçük hata yakınlarında daha hızlı ve kesindir. Her başarılı adımdan sonra, yani performans fonksiyonunun azalmasında μ azaltılır ve sadece deneme niteliğindeki bir adım performans fonksiyonunu yükseltecekse μ artırılır. Bu yöntemle, algoritmanın her iterasyonunda, performans fonksiyonu daima azaltılır.

Genel olarak Levenberg - Marquardt algoritması yavaş yakınsama probleminden etkilenmez. Burada hedef, performans fonksiyonun en küçük yapacak ağırlık değerini bulmaktadır (Bolat ve Kalenderli, 2003).

4. MATERYAL VE YÖNTEM

4.1 Deney Düzeneđi

Stirenin serbest radikalik polimerizasyonu 1.6 L hacminde, sođutma ceketli cam bir reaktör içinde gerekleřtirilmiřtir. Reaktör dökme camdan yapılmıř bir karıřtırma kabıdır. Reaktörün iç hacmi 1600 mL, sođutma ceketinin hacmi ise 980 mL'dir. alıřmalardaki özelti miktarı 770 mL stiren ve 330 mL toluen olmak üzere 1100 mL'dir.



řekil 4.1 Deney düzeneđi fotoğrafı



The diagram illustrates a stirred reactor system controlled by a digital computer. The reactor, labeled 'REAKTÖR', is a stirred tank reactor with an internal stirrer and multiple temperature sensors (indicated by 'T' in circles). The control system consists of a 'Sayısal Bilgisayar' (Digital Computer) connected to two 'A/D' (Analog-to-Digital) converters, which receive signals from the reactor's temperature sensors. The computer outputs a signal to a 'D/A' (Digital-to-Analog) converter, which then sends a signal to a 'Triyak Modülü' (Triac Module). The triac module controls a 'Soğutma Suyu Pompası' (Cooling Water Pump), which draws water from a 'Soğutma Suyu Besleme Tankı' (Cooling Water Supply Tank). The pump circulates the cooling water through a jacket or coil around the reactor. An 'N₂' gas cylinder is also connected to the reactor system, likely for inerting purposes.

Reaktörün sıcaklığı, soğutma suyu giriş ve çıkış sıcaklıkları termočiftlerle okunmuş ve bilgisayara Superlogics 8018 girdi modülü yardımıyla aktarılmıştır. Superlogics 8520 ‘RS-232 to RS-485’ dönüştürücü modülü kullanılmıştır. Reaktör içindeki ısıtıcı Superlogics 8024 14-bit analog çıktı modülü ve May PCM 220 triyak modülü ile bilgisayara bağlanmıştır. Ayrıca May PCM 220/24V PS modülü güç kaynağı olarak kullanılmıştır. Soğutma suyu akış hızını ayarlamak için kullanılan peristaltik pompanın hem elle hem de bilgisayar ile devir hızı ayarlanabilmektedir.

Polimerizasyonda kullanılan stiren, TÜPRAŞ Körfez Rafinerisinden alınmış, vakum damıtma ünitesi ile damıtılarak içinde bulunan inhibitörlerden ve safsızlıklarıdan

arındırılmıştır. Başlatıcı olarak kullanılan benzoilperoksit ise kloroform-metanol karışımında kristallendirilerek saflaştırılmıştır.

4.2 Deney Yöntemi

Deneyler üç farklı optimum sıcaklık profilinde ve bir sabit sıcaklıkta gerçekleştirilmiştir.

Ayrıca kontrol çalışmaları için kontrol sisteminin etkinliğini gözlemek ve kontrol değişkenlerini belirlemek amacıyla su deneyleri yapılmıştır.

Soğutma ceketli reaktörde kontrol çalışmaları için reaktöre stirenin toluen içindeki %70'lik çözeltisinden 1.1 lt konmuş, soğutma suyu sabit bir akış hızında (47 ml/dk) gönderilmiş ve ısıtıcı ile belli bir ısı reaktöre verilmiştir. Sistem tepkimenin başlayacağı sıcaklığa geldiğinde reaktöre benzoilperoksit ani olarak beslenerek polimerleşme tepkimesi başlatılmıştır. Deneyler, istenen dönüşüm ve molekül ağırlığı esas alınarak hesaplanan optimum tepkime süresi ve başlatıcı derişimi için çeşitli sıcaklık profillerinde gerçekleştirilmiştir. Sıcaklık değişimleri bilgisayarda gözlenerek YSA Model Öngörülü Kontrol algoritması ile kontrolü yapılmıştır. Tepkime sonunda çözeltiden alınan numunelerden çöktürme yöntemi ile monomer dönüşümü tayin edilmiştir (EK-1).

4.3 Deneysel Çalışmalar İçin Gerekli Hazırlık İşlemleri

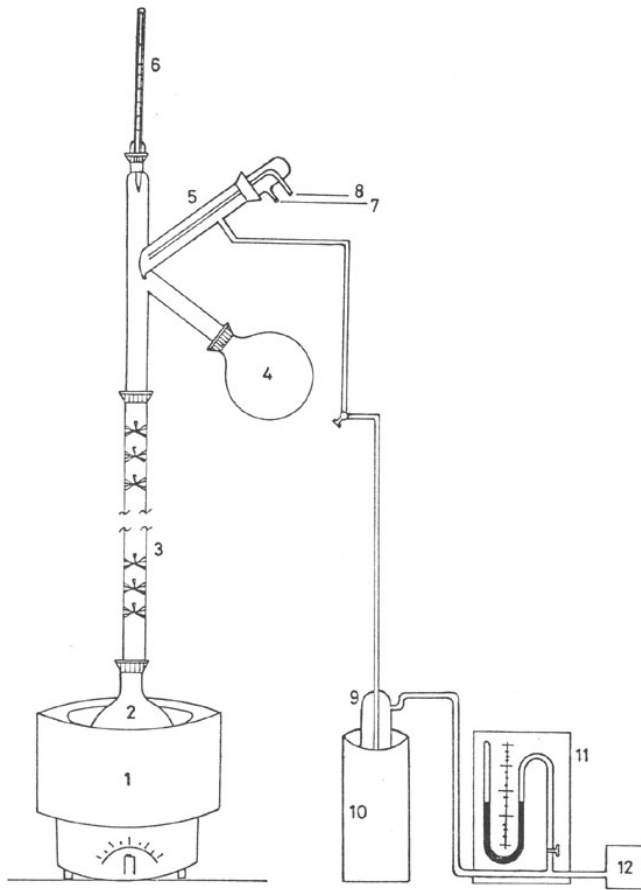
Bu kısımda polimerleşme deneylerine başlamadan önce yapılan hazırlıklar verilmiştir.

Stirenin saflaştırılması: Stiren, TÜPRAŞ'tan temin edilmiş ve deneylerden kısa süre önce 20-30 mmHg vakum altında damıtılarak saflaştırılmıştır. Stirenin saflaştırılması için kullanılan düzeneğin şeması Şekil 4.2'de verilmiştir.

Bu üniteyi oluşturan birimler:

1. Su banyolu ısıtıcı
2. Damıtılacak stiren
3. Vigros kolon
4. Damıtık stireni toplama balonu
5. Parmak soğutucu
6. Termometre
7. Soğutma suyu girişi

8. Soğutma suyu çıkışı
9. Tuzak
10. Devar kabı
11. Manometre
12. Vakum pompası



Şekil 4.4 Stiren saflaştırma ünitesi

Benzoilperoksitin kristallendirilmesi: Stiren serbest radikalik polimerleşme tepkimesinde başlatıcı olarak benzoilperoksit kullanılmıştır. Benzoilperoksit içerisindeki safsızlıkların ve nemin uzaklaştırılması için kristallendirme işlemine tabi tutulmuştur. Kristallendirme işlemi aşağıdaki gibi yapılmıştır.

50 g benzoilperoksit 200 mL kloroform içerisinde yaklaşık 40°C’da karıştırılarak çözülür. Çözelti süzgeç kağıdından süzülür ve 500 mL metanol içine dökülerek buzlu ortamda soğutulmak suretiyle kristallendirilir. Kristaller bir süzgeç kağıdı yardımıyla

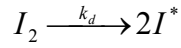
süzölür ve desikatörde vakumlanarak metanol uzaklaştırılır. Böylece %99-99.5 saflıkta benzoilperoksit elde edilir.

5. STİREN POLİMERİZASYON KİNETİĞİ VE MODELLENMESİ

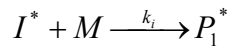
5.1 Stiren Çözelti Polimerizasyonunun Kinetiği

Stirenin toluen çözücüsü içerisinde benzoilperoksit başlatıcısı ile gerçekleşen serbest radikalik polimerizasyon tepkimesi başlama, büyüme ve sonlanma tepkimelerinden oluşur (Basan, 2001). Bu tepkimeler şunlardır:

a) İlk Radikal Oluşumu: Bir monomerin diğer monomerle tepkimeye girebilmesi için aktif hale gelmesi gerekmektedir. Bunun için de başlatıcı bileşikler kullanılır. Bu çalışmada başlatıcı olarak benzoilperoksit kullanılmıştır. Benzoil peroksit ($C_{14}H_{10}O_4$) 60 °C üzerindeki sıcaklıklarda parçalanarak benzoil oksid radikalleri ve az oranda ikincil radikaller verir.



b) Başlama tepkimesi: Işınlama, sıcaklık ya da bir başlatıcı madde kullanılarak zincir tepkimesi başlatılır. Serbest radikaller, monomerin çift bağının bir elektronunu çekerek bağ oluşturur. Diğer elektron ise monomerin ucuna kayar ve böylece ilk polimerik radikal oluşur.



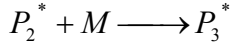
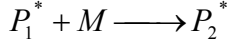
Bir redoks tepkimesinde başlatıcı molekül başına bir radikal oluştuğu kabul edilir. Bu yüzden yukarıda verilen tepkimeden %100 verimle radikal elde edilemez. Ortamdaki çözücü molekülünün başlatıcı molekülünü kafes gibi çevirmesinden dolayı başlatıcı molekülünden oluşan radikaller kısa zaman içinde ayrılmadan birleşme yaparlar. Çözücü ve başlatıcıya göre radikallerin kafesten kurtulması için gereken süre değişir. Bütün başlatıcı moleküller aynı zamanda radikallerine ayrılmazlar. İlk oluşan radikaller, birkaç monomer ile tepkimeye girerek oligomer radikalleri oluştururlar. Ortamda başlatıcı derişimi her zaman yüksek olduğundan dolayı oluşan oligomer radikali başlatıcı ile birleşip başlatıcıyı etkisiz hale getirir. Başlatıcı ve radikal derişimleri azalır. Böylece bir radikal randımanı faktörü ‘f’ üzerinden başlatıcı derişimine bağlanır. Başlatıcı oluşum hızını veren denklem f ile çarpılır.

f = Başlatıcı molekül sayısı/ Oluşan radikal sayısı

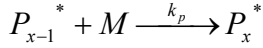
f: Teorik olarak oluşabilecek radikal sayısı

Bu çalışmada f=0.5 alınmıştır.

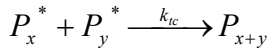
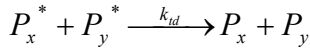
c) Büyüme tepkimesi: Başlama basamağında oluşan ilk polimerik radikallere monomer katarak zincirin uzamasını sağlar.



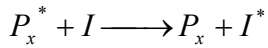
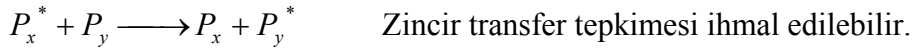
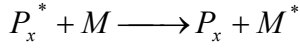
...



d) Sonlanma tepkimesi: İki aktif zincirin ayrı ayrı aktifliğini yitirerek veya iki aktif polimer zincirinin birleşerek ölü polimer zincir haline geçmesi şeklinde gerçekleşir.



e) Zincir transfer basmağı: P_x^* radikali monomer, polimer molekülü veya başlatıcı ile de tepkimeye girebilir.



Araştırmalar sonucunda zincir transfer tepkimesinin ihmal edilebilir olduğu görülmüştür (Basan, 2001). Ayrıca kinetik sabitlerin de zincir uzunluğundan bağımsız olduğu kabul edilmiştir. Yukarıdaki mekanizmalara göre başlatıcı (I), monomer (M), x zincir uzunluğuna sahip ölü polimer (P_x) ve aktiflenmiş polimer (P_x^*) derişimi için kütle denklemleri ile toplam radikal derişimini veren denklemler şu şekilde yazılır.

Başlatıcının parçalanma hızı:

$$-\frac{dI}{dt} = k_d I \quad (5.1)$$

Monomer kaybolma hızı:

$$\frac{dM}{dt} = -k_i M R^* - k_p M \sum_{n=1}^{\infty} P_n^* \quad (5.2)$$

Başlatıcıdan oluşan radikallerin harcadığı monomer miktarı çok az olduğundan ihmal edilebilir.

$$R_m = -\frac{dM}{dt} = kMP^* \quad (5.3)$$

$$\frac{dR}{dt} = 2fk_d I - k_i MR \quad (5.4)$$

Ölü polimer oluşum hızı:

$$\frac{dP_i}{dt} = k_t (I^*)^2 + k_t P_i^* (I^* + \sum P_j^*) \quad (5.5)$$

Aktiflenmiş polimerin oluşum hızı:

$$\frac{dP_1^*}{dt} = k_i MR^* - k_p MP_1^* - (k_{td} + k_{tc}) P_1^* \sum_{n=1}^{\infty} P_n^* \quad (5.6)$$

$$\frac{dP_x^*}{dt} = k_p M (P_{x-1}^* - P_x^*) - (k_{td} + k_{tc}) P_x^* \sum_{n=1}^{\infty} P_n^* ; \quad x \geq 2 \quad (5.7)$$

$$\frac{dP_x}{dt} = k_{td} P_x^* \sum_{n=1}^{\infty} P_n + \frac{1}{2} k_{tc} \sum_{n=1}^{x-1} P_{x-1}^* P_n^* ; \quad x \geq 2 \quad (5.8)$$

Matematiksel basitleştirme için kullanılan varsayımlar şunlardır:

- Polimerizasyon süresince karışım hacmi sabittir.
- Uzun zincir yaklaşımı geçerlidir.
- Radikallerin aktivitesi zincir uzunluğundan bağımsızdır.
- Yarı kararlı hal yaklaşımı radikal derişimleri için geçerlidir ve zincir transfer tepkimeleri ihmal edilmiştir.
- Jel etkisi sonlanma hızını geciktirir çünkü dönüşümün artması sırasında viskozite artmıştır. Bu etki sonlanma hız sabiti (k_{td}) ve dönüşümün (m) bir fonksiyonu olarak göz önünde bulundurulmuştur.

Buna göre sonlanma hız sabiti:

$$k_t = k_{tc} + k_{td} = k_{to}(y)g^2(m) = At \exp(-E_t y)g^2(m) \quad (5.9)$$

şeklinde ampirik bir bağıntıyla ifade edilir. Burada g jel etkisini göstermektedir ve dönüşüme aşağıdaki şekilde bağlıdır.

$g(m)$	$m \geq m_1$	jel etkisi olduğunda
$g=1$	$0 \leq m \leq m_1$	jel etkisi olmadığında

$g(m)$, m 'nin fonksiyonu, $y = 1/RT$, m_1 , jel etkisinin önemli olduğu durumun üzerindeki monomer dönüşümüdür.

Optimum ani başlatıcı ilaveli değişkenlerin hesabı için yapılan işlemlerde $g(m)=1$ alınmıştır. Hesaplamalar için seçilen monomer son dönüşümlerinde jel etkisinin çok önemli olmadığı yapılan kaynak araştırmaları sonucunda görülmüştür. Buna göre sonlanma hızı sabiti jel etkisi olmadığı durumlarda ifade edilmiştir.

$$k_t = k_{to}(y) = k_{to}(1/RT) \quad (5.10)$$

Başlama basamağında harcanan monomer, önemsiz olduğu için çoğalma basamağı yanında ihmal edilebilir.

Polimerizasyon hızı:

$$R_p = k_p [M][P^*] \quad (5.11)$$

Sonlanmanın birleşerek sonlanma üzerinden gerçekleştiği varsayılır. Orantısız sonlanma adımı ihmal edilirse, sonlanma tepkimesi için hız ifadesi:

$$R_p = (k_{tc} + k_{td})[P^*]^2 \quad (5.12)$$

Polimerizasyonun başlamasından kısa bir süre sonra ortamdaki radikallerin harcanma ve oluşma hızları hemen hemen birbirine eşit olacağından polimerizasyon ortamındaki radikal derişimi sabit kalır ve zamanla pek değişmez. Bu duruma kararlı hal denir. Radikalik zincir polimerizasyonu için verilen mekanizmada radikaller, başlatıcının bozunma adımıyla oluşmakta, sonlanma tepkimesinde ise kaybolmaktadır. Kararlı halde bu iki hızın birbirine eşit olması gerekir.

$$2fk_d[I] = (k_{tc} + k_{td})[P^*]^2 \quad (5.13)$$

ve P^* değeri çekilirse;

$$P^* = \left(\frac{2fk_d[I]}{k_{tc} + k_{td}} \right)^{0.5} \quad (5.14)$$

Eşitlik (5.14), eşitlik (5.11)'de yerine koyulup, $f=0.5$ alınması durumunda, polimerizasyon hızı;

$$R_p = k_p [M] \left(\frac{k_d[I]}{k_{tc} + k_{td}} \right)^{0.5} \quad (5.15)$$

$$k = k_p \left(\frac{k_d}{k_{tc} + k_{td}} \right)^{0.5} \quad (5.16)$$

$$R_p = k [M][I]^{0.5} \quad (5.17)$$

Tepkime hız ifadesi eşitlik (5.17)'deki gibi elde edilmiştir.

5.2 Soğutma Ceketli Kesikli Polimer Tepkime Kabının Matematiksel Modeli

Stiren polimerizasyonunun gerçekleştiği soğutma ceketli kesikli bir reaktörün enerji ve kütle denklemlerinin yazılabilmesi için yapılan varsayımlar şunlardır:

- i) Tepkime kabı içinde tam karışma olup her bölgesinde sıcaklık ve konsantrasyon aynıdır
- ii) Yoğunluk değişimi ihmal edilip tepkime boyunca tepkime kabı içinde her bölgede yoğunluk sabit kabul edilir. Yığın polimerizasyonunda bu varsayım geçersizdir ancak çözelti polimerizasyonunda geçerli kabul edilir.
- iii) Tepkime kabı içindeki karışımın ortalama ısı kapasitesi sıcaklık ve konsantrasyona bağlı değildir.
- iv) Polimerizasyonun başlama ve sonlanma basamaklarındaki ısı, çoğalma basamağının yanında ihmal edilmiştir.
- v) Soğutma suyu giriş sıcaklığı sabittir.
- vi) Monomer değişim hızı, polimer üretim hızına eşit alınmıştır.

Tepkime kabı içi enerji denkliği:

$$V\rho C_p \frac{dT}{dt} = Q + (-\Delta H)R_m V - UA(T - \bar{T}_c) \quad (5.18)$$

R_m : Monomer tepkime hızı

$$\frac{dM}{dt} = R_m = k MI_0^{0.5} \quad (5.19)$$

$$\bar{T}_c = \frac{T_{ci} + T_{co}}{2} \quad (5.20)$$

Ceket için enerji denkliği:

$$V_c \rho_c C_{pc} \frac{dT_{co}}{dt} = mC_{pc}(T_{ci} - T_{co}) + UA(T - \bar{T}_c) \quad (5.21)$$

Bu bağıntılarda U tüm ısı aktarım katsayısı, monomer dönüşümü sırasında değişen ortam viskozitesine bağımlı alınmıştır. (Hasan, 1990)

$$U = \frac{1}{S\mu_r^{0.33} + F} \quad (5.22)$$

Burada S ve F birer sabittir.

$$S = \frac{D_t^{1.25}}{1.01k_r^{0.67} \rho^{0.66} N^{0.66} D_i^{1.45} C_p^{0.33} H_i^{0.12}} \quad (5.23)$$

$$F = \frac{D_t}{D_t + 2x h_o} \frac{1}{h_o} + \frac{D_t x}{D_{LM} k_c} \quad (5.24)$$

Verilen denklemlerin sayısal bilgisayar hesaplamalarında kullanılabilmeleri için gerekli olan hız sabitlerinin bilinmesi gerekir. Stiren polimerizasyonu kinetik açıdan detaylı olarak değişik araştırmacılar tarafından incelenmiştir. Deney koşullarımıza en uygun kinetik veriler literatürden alınmış ve Çizelge 5.1’de verilmiştir.

Çizelge 5.1 Monomer (Stiren) ve başlatıcı (Benzoilperoksit) için kullanılan kinetik sabitler ve sistemin fiziksel sabitleri (Chen and Huang, 1980)

Sabit	Değeri	Birimi
A_p	1.051×10^7	1/mol s
A_t	1.255×10^9	1/mol s
A_d	2.6×10^{16}	1/s
E_p	7060	cal/mol K
E_t	1680	cal/mol K
E_d	34200	cal/mol K
M_0	6.092	mol/l

Polimerizasyon ortamının viskozitesini veren ampirik bir denklem literatürden bulunmuştur (Hasan, 1990). Buna göre;

$$\mu_r = \mu_0 + 0.9615 \frac{[(M_0 - M)MW]^{0.654}}{(I_0 - I)^{-0.588}} \quad (5.25)$$

Bu eşitlikte başlangıç viskozitesi μ_0 olup (5.26) denklemiyle verilmiştir.

$$\mu_0 = 3.727 \times 10^{-3} T_0 + 3.009 \times 10^{-3} M_0^2 - 327.6 I_0^3 \quad (5.26)$$

Enerji denklıkları viskozitenin ilavesi ile yeniden düzenlenirse aşağıdaki denklemler elde edilir.

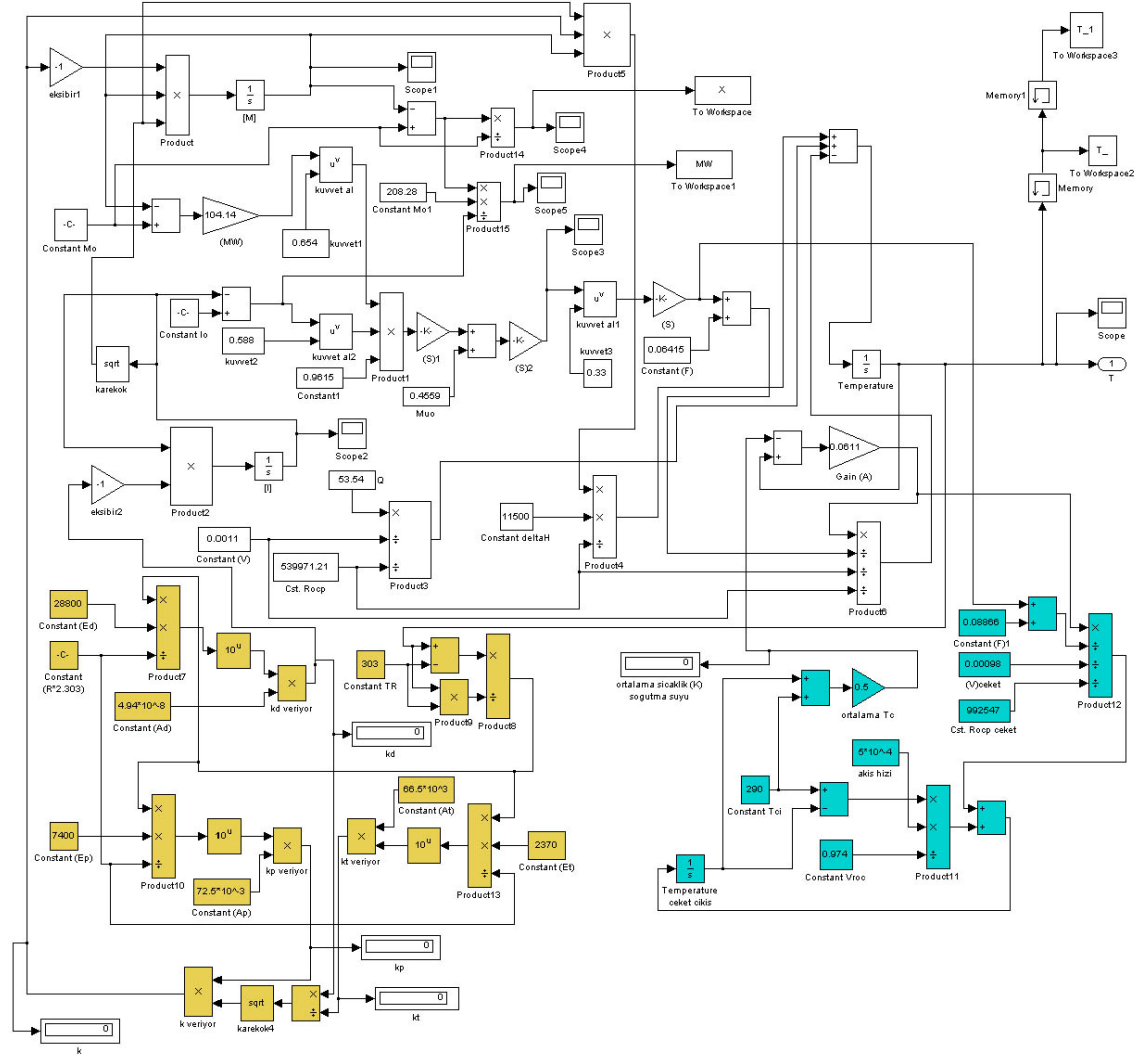
$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q}{V\rho C_p} + \frac{(-\Delta H)R_m}{\rho C_p} - \frac{A(T - \bar{T}_c)}{V\rho C_p (S\mu_r^{0.33} + F)} \quad (5.27)$$

$$\frac{dT_{co}}{dt} = \frac{m(T_{ci} - T_{co})}{V_c \rho_c} + \frac{A(T - \bar{T}_c)}{V_c \rho_c C_{po} (S\mu_r^{0.33} + F)} \quad (5.28)$$

5.3 Tepkime Kabının ve Optimizasyon Programının Simulink® Modelleri

Stiren polimerizasyonunun gerçekleştiği soğutma ceketli tepkime kabının dinamiğinin ve optimizasyon programının Simulink® modelleri aşağıda verilmiştir.

5.3.1 Dinamik model



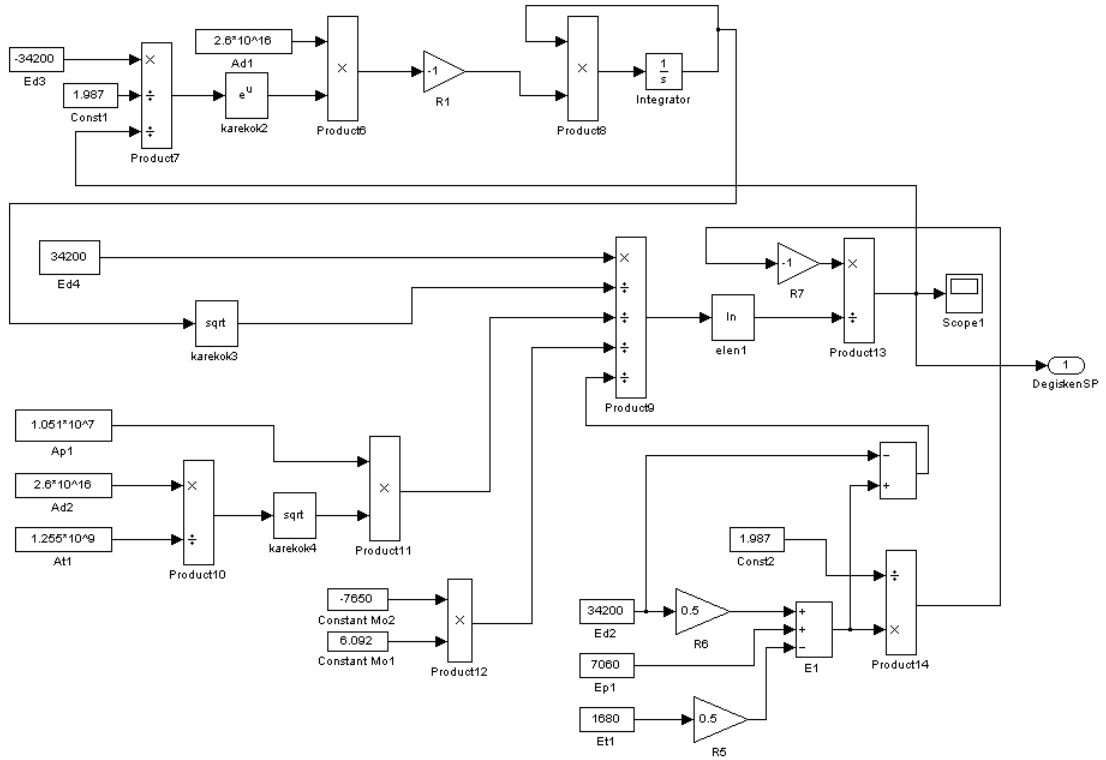
Şekil 5.1 Tepkime kabı dinamik modelinin MATLAB® Simulink® ortamındaki genel görünümü

Yukarıdaki şekli kısaca açıklamak gerekirse; sarı ile gösterilen kutularda polimerleşme tepkimesi hız sabitlerinin sıcaklık değişikçe değişmesi dinamik modele yansıtılmıştır. Mavi ile gösterilen kutularda soğutma suyu için kurulan enerji denkliği (5.28) çözülmektedir. Geri kalan beyaz kutularda ise, tepkime kabının enerji denkliği (5.27)

çözülmemektedir. Ayrıca, polimer molekül ağırlığı, dönüşüm, girdi derişimi, tepkime hız sabitleri ve sıcaklık gibi değışkenlerin de tepkime boyunca nasıl değışim gösterdiklerinin sayısal ve grafiksel olarak elde edilmesi için kullanılan kutular da şekilde görölmektedir.

Matematiksel modelde yer alan diferansiyel denklemlerin çözümü için yapılan integral alma işleminde MATLAB®'daki değışken adımli çözüm yöntemlerinden ode45 (Dormand-Prince) kullanılmıştır.

5.3.2 Optimum işletim sıcaklığı için Simulink® programı



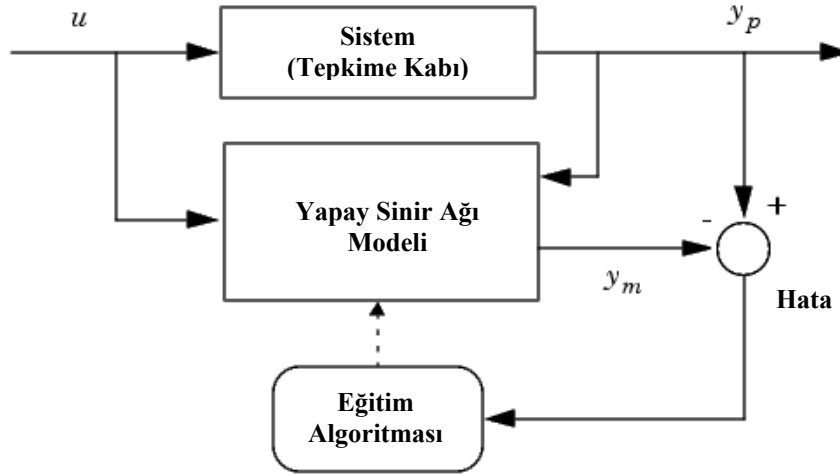
Şekil 5.2 Optimum işletim sıcaklığı hesaplamalarını gösteren Simulink® ekranı

Set noktası optimizasyonu için gereken denklemler literatürden (Özkan, 1997) bulunarak bilgisayar ortamına aktarılmıştır. Şekil 5.2'de gösterilen programın zamana bağılı olarak hesapladığı optimum sıcaklık değeri tepkimenin kontrolü gerçekleştirilmiştir.

Bütün matematiksel modeli bir anda görselleştirmemizi sağlayan bu gösterimde, varsa modeldeki kimi hatalar kolay fark edilmekte, değişiklikler basit tıklamalarla yapılabilmektedir. Bununla beraber değişkenlerin gerek grafiksel gerekse sayısal değer olarak gösterimindeki ve kaydedilmesindeki kolaylık sebebiyle Simulink® kullanılmıştır.

6. YSA MODEL ÖNGÖRÜLÜ KONTROL ALGORİTMASI

YSA Model Öngörülü Kontrol iki aşamadan oluşmaktadır. Sistem tanımlama ve kontrol. İlk aşamada, sistemin dinamiğini temsil edebilecek bir Yapay Sinir Ağı'nın eğitilmesi gerçekleştirilir. Sistem çıktısı ile YSA Model çıktısı arasındaki tahmin hatası, YSA'nın eğitim sinyali olarak kullanılır. Bu süreç Şekil 6.1'de gösterildiği gibidir.



Şekil 6.1 Sistem tanımlama aşamasının şematik gösterimi.

YSA modeli, sistemin önceki girdi ve çıktıları kullanarak sistemin gelecekteki çıktı değerini tahmin eder. YSA'nın mimarisi saptandıktan sonra eğitime geçilir. YSA'nın kullanacağı girdi ve çıktıların sayısı, katman sayısı, her bir katmandaki nöron sayısı ve nöronların aktivasyon fonksiyonları YSA'nın mimarisini oluşturur. Eğitime geçilmeden önce bunların hepsinin belirlenmesi gerekmektedir. Özellikle katman ve nöron sayıları YSA'nın başarımını doğrudan etkilemektedir. Ancak bu sayıların en uygun değerlerinin belirlenmesi için bilinen kesin bir yöntem yoktur. Yapılan araştırmalarda bu değerlerin deneme yanılma yoluyla bulunması tavsiye edilmiştir.

Eğitim, eldeki girdi-çıkı verilerinin YSA'ya sunulması ve YSA'nın girdi değerlerine karşı çıktı değerlerini verecek ağırlıkları hesaplaması işlemidir. Önceden belirlenmiş bir başarımla koşulu ulaşıldığında eğitim durur.

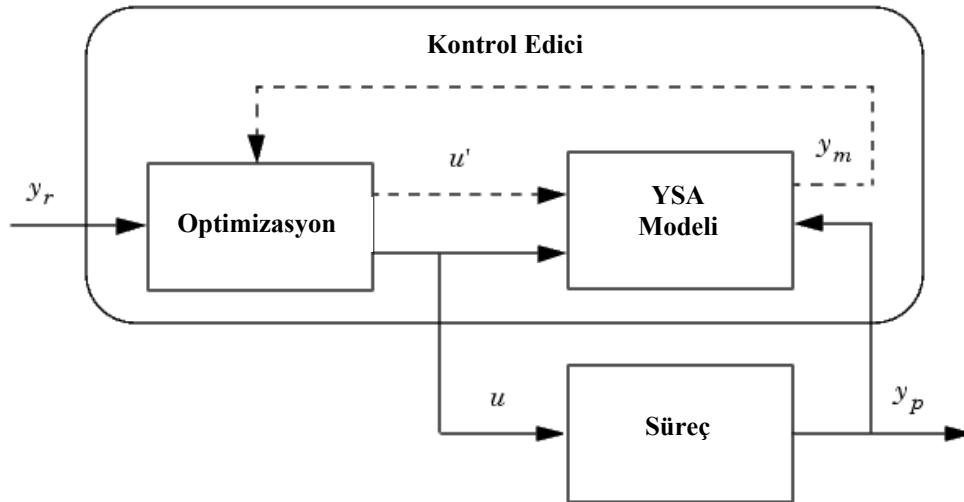
Eğitimin ne zaman duracağı YSA'nın başarımını doğrudan etkiler. Yeterince eğitilmemiş bir YSA sistemi iyi temsil etmeyecektir. Gereğinden fazla eğitilmiş bir YSA ise kendisine sunulan veri setini ezberleyecek ve bu set dışındaki değerler ile karşılaştığında yanılacaktır.

Sistem tanımlama aşaması yukarıda anlatıldığı gibi gerçekleştirildikten sonra sistemin kontrolüne geçilebilir. YSA modeli, belirli bir zaman ufku üzerinden sistemin yanıtını tahmin eder. Bu tahminler, aşağıdaki maliyet fonksiyonunu minimum yapacak kontrol sinyalini hesaplayan sayısal bir optimizasyon programı tarafından kullanılır.

$$J = \sum_{j=N_1}^{N_2} (y_r(t+j) - y_m(t+j))^2 + \alpha \sum_{j=1}^{N_u} (u'(t+j-1) - u'(t+j-2))^2 \quad (6.1)$$

Maliyet fonksiyonu denkleminde (4.1); N_1 , N_2 Minimum ve maksimum tahmin ufukları, N_u kontrol maliyet ufku, u' kontrol sinyali, y_r istenen yanıt, y_m YSA modeli yanıtını temsil etmektedir. α değeri, kontrol artımı kareleri toplamının maliyet fonksiyonuna yapacağı katkıyı belirler.

YSA Model Öngörülü Kontrol süreci şematik olarak Şekil 6.2'de gösterilmektedir.



Şekil 6.2 YSA Model Öngörülü Kontrol Blok Diyagramı

Maliyet fonksiyonunun u 'ya göre türevi alınarak sıfıra eşitlenir, buradan u değerleri bulunur. Ancak prosesin ileri zamanlarında türev alma işlemi zorlaşır bu durumda yeni

yaklaşımlar ile diferansiyel eşitlik çözülmeye çalışılır. Maliyet fonksiyonunun minimizasyonu için MATLAB®'ın araç kutusunda hazır fonksiyonlar mevcuttur (csrchgol, csrchbac, csrchhyb, csrchbre, csrchcha), bu fonksiyonlardan biri kullanılarak optimizasyon problemi çözülür. Hesaplanan kontrol sinyali tepkime kabına gönderilir.

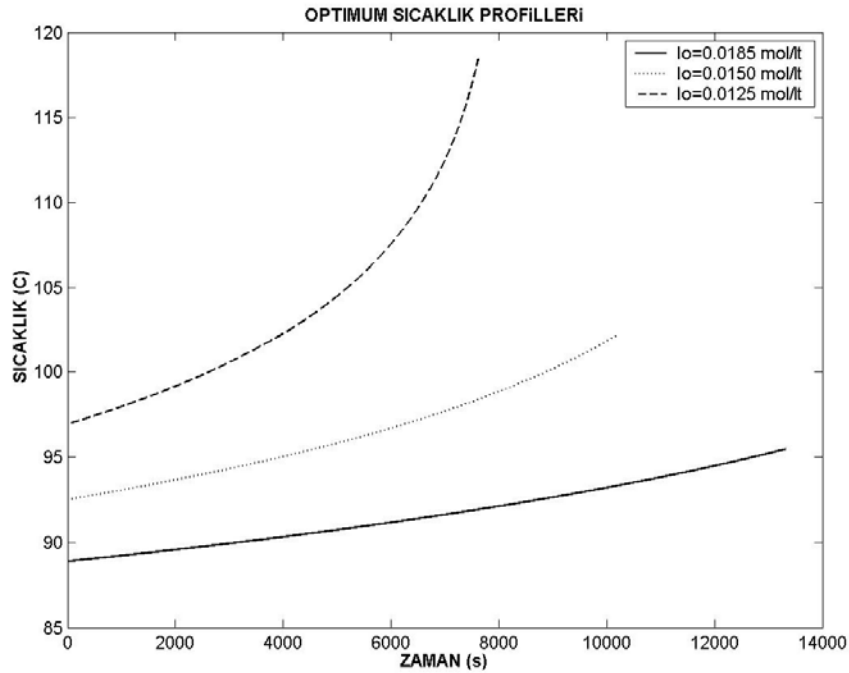
7. BULGULAR

7.1 Kontrolün Teorik Olarak (Benzetim ile) Sağlanması

Kesikli tepkime kabının Bölüm 5’te verilen matematiksel modeli MATLAB® Simulink® platformunda ifade edilmiştir. Ardından, YSA Öngörülü Denetim (Neural Network Predictive Control) işlevi kullanılarak önce dinamik modelden veri alınmış, ardından YSA bu verilerle eğitilerek sistem tanımlama gerçekleştirilmiş ve son olarak tepkimenin optimum sıcaklık profilinde kontrolü, YSA öngörülü denetici tarafından, gerçekleştirilmiştir. Sırayla inceleyecek olursak;

7.1.1 Optimum sıcaklık profili

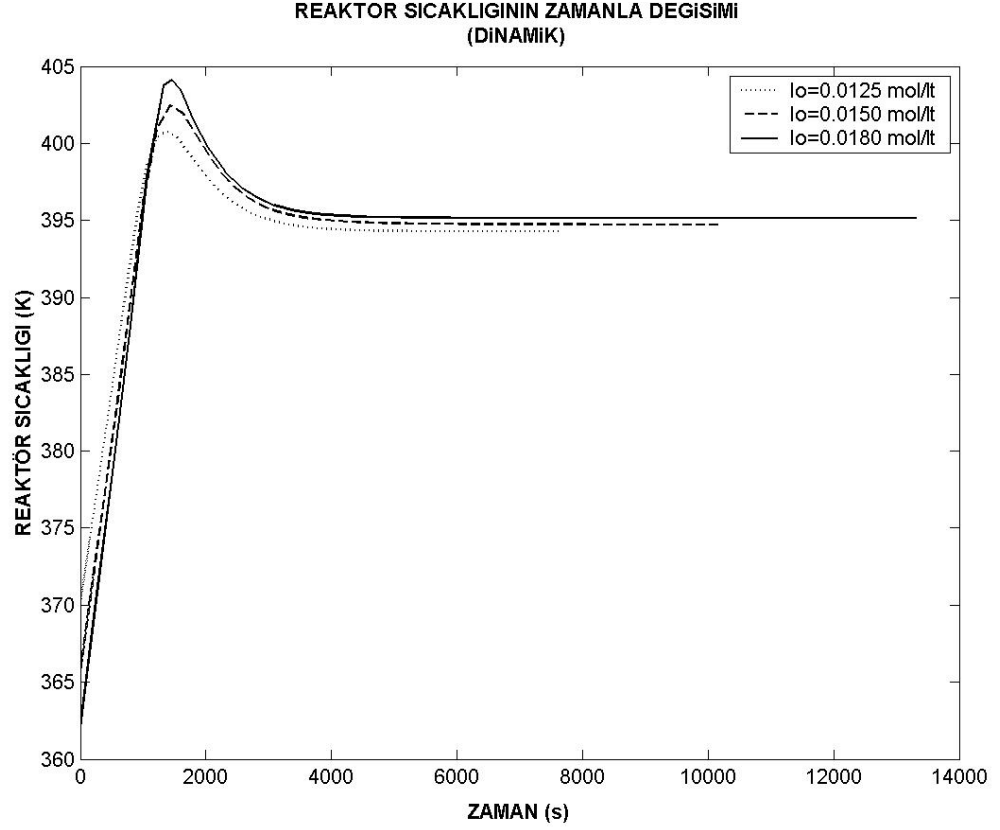
İstenen molekül ağırlığında polimerin elde edilmesi için tepkimenin belirli koşullarda gerçekleştirilmesi gerekmektedir. Minimum zaman optimum sıcaklık profili hesabı daha önceki çalışmalarda yapılmıştır (Özkan vd., 1998). Optimizasyon problemi, verilen bir başlatıcı başlangıç konsantrasyonunda istenen dönüşüm ($X = 0.5$) ve ortalama molekül ağırlığı ($M_{nd} = 52000$ g/mol)’ye minimum tepkime süresinde ulaşmak için optimum sıcaklık profilinin hesabını içerir. Seçilen üç farklı başlatıcı başlangıç konsantrasyonu için elde edilen optimum sıcaklık profilleri aşağıdaki gibidir.



Şekil 7.1 Polimerleşme tepkimesinin gerçekleşeceği optimum sıcaklık profilleri.

7.1.2 Dinamik model

Kesikli tepkime kabının dinamik modeli Bölüm 5.1 ve 5.2’de anlatıldığı gibi elde edildikten sonra MATLAB®’da yazılarak çözülmüştür.



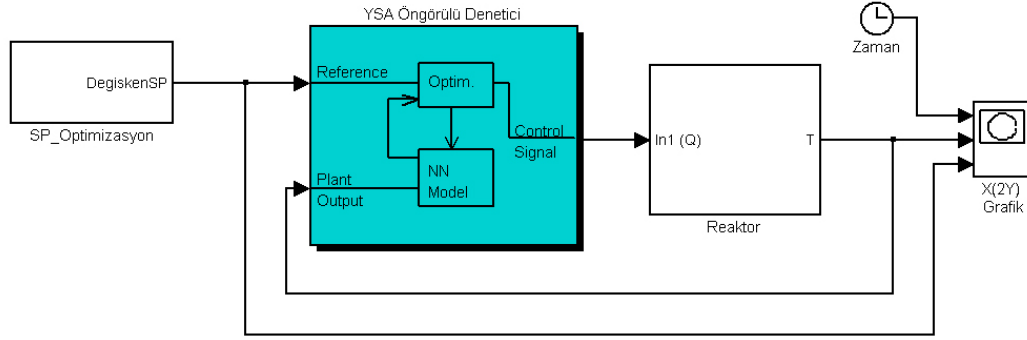
Şekil 7.2 Reaktör sıcaklığının açık hatta zamanla değişimi ($I_0=0.0125$, 0.0150 ve 0.0185 mol/l)

Çizelge 7.1 Üç farklı başlatıcı başlangıç derişimi için açık hat dinamik benzetim sonuçları

No	T_0 (K)	M_0 (mol/l)	I_0 (mol/l)	t_f (sn)	Dönüşüm	M_n (g/mol)
1	370	6.092	0.0125	7620	0.33	33849
2	365	6.092	0.0150	10200	0.36	30203
3	362	6.092	0.0185	13320	0.38	26168

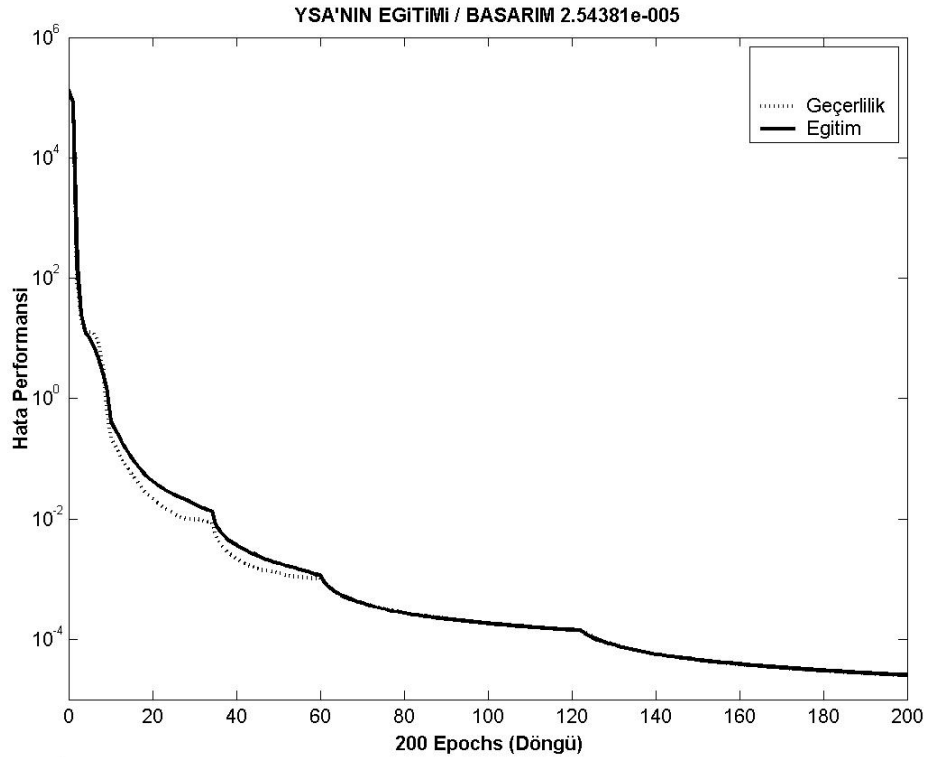
7.1.3 YSA model öngörülü kontrol

YSA Model Öngörülü Kontrol sisteminin MATLAB® Simulink® ortamındaki genel görünümü Şekil 7.3'te verilmiştir.



Şekil 7.3 YSA Model Öngörülü Kontrol Simulink® görünümü

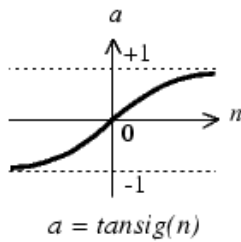
Bölüm 6'da belirtildiği gibi YSA Model Öngörülü Kontrol, sistem tanımlama ve kontrol aşamalarından oluşur. Sistem tanımlama aşamasında, YSA modeli oluşturulurken, Şekil 7.4'te görüldüğü gibi önceden belirlenmiş bir başarımla koşulu ulaşılınca eğitim durur. Bu eğitimde ulaşılan koşul maksimum döngü sayısıdır. YSA modeli benzetim ortamında elde edilen 5000 adet girdi-çıkı verisini kullanarak gelecekteki çıkı değeri tahmin etmektedir. Oluşturulan YSA'da 4 girdi (T_{i-1} , T_{i-2} , Q_{i-1} , Q_{i-2}) ve 1 çıkı T_i vardır. Gizli katman sayısı 1 olup bu katmanda 2 adet nöron bulunmaktadır.



Şekil 7.4 Eğitim sürecinde hatanın giderek azaldığını ve önceden belirlenmiş bir başarımla ulaşıldığında eğitimin durduğunu gösteren eğri.

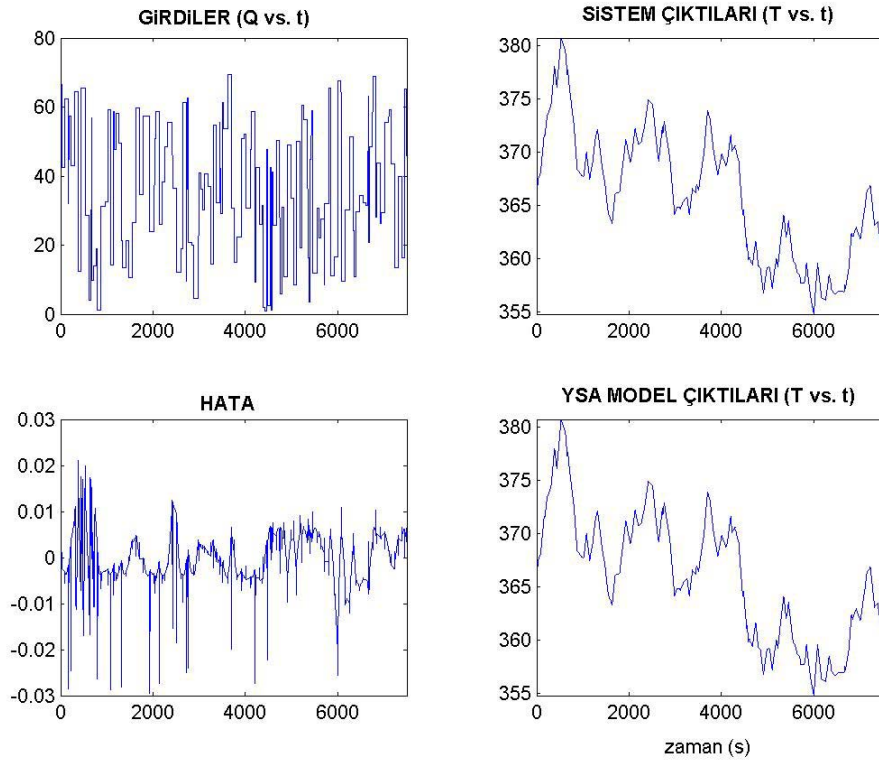
Nöronlarda kullanılan aktivasyon fonksiyonu (7.1) hiperbolik tanjant sigmoid (tansig) fonksiyonudur. Fonksiyonun grafiksel gösterimi Şekil 7.5'te verilmiştir.

$$\tan sig(x) = \frac{2}{1 + \exp(-2x)} - 1 \quad (7.1)$$



Şekil 7.5 Hiperbolik Tanjant Sigmoid Fonksiyonu.

YSA eğitiminde kullanılan girdiler sisteme verilen ısı (Q) ile tepkime kabı sıcaklığı (T) değerleridir. Eğitim için 5000 adet veri kullanılmıştır. Seçilen eğitim algoritması Levenberg-Marquardt algoritmasıdır. Sistemin girdi-çıkış değerleri, YSA Modelinin çıktıları ve model hatası Şekil 7.6'da verildiği gibidir.



Şekil 7.6 YSA eğitimi için kullanılan veriler ve bu verilerle eğitilen YSA Modelinin çıktıları.

Çizelge 7.2 YSA ile Sistem Tanımlama Parametreleri

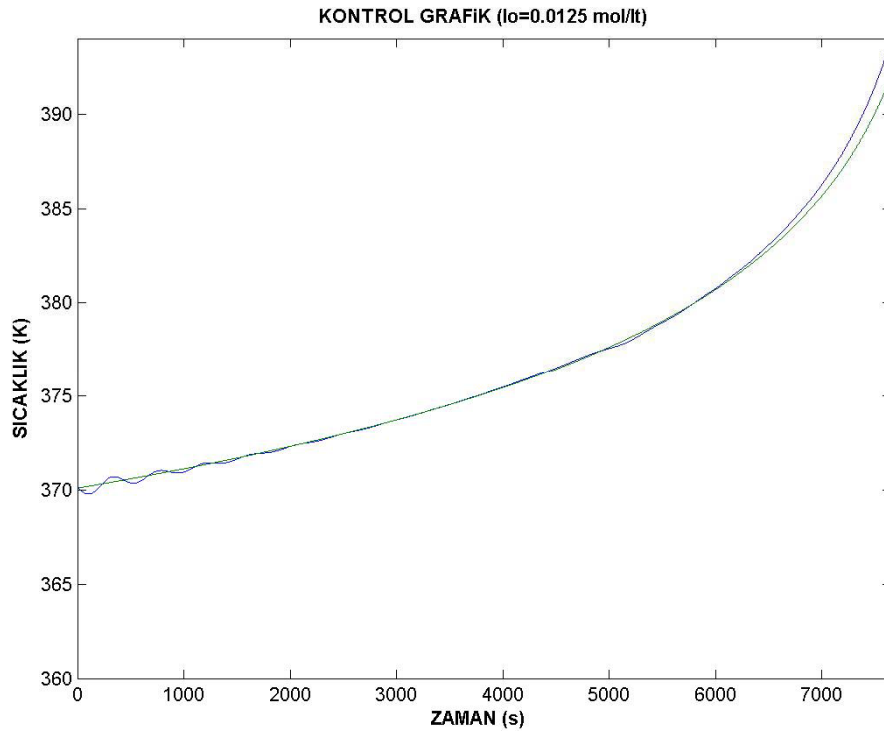
Gizli katmandaki nöron sayısı	2
Örnekleme aralığı	2 s
Gecikmeli sistem girişi	2
Gecikmeli sistem çıkışı	2
Örnek sayısı	5000
Maksimum sistem girişi	70 cal/s
Minimum sistem girişi	0 cal/s
Giriş sinyal genişliği	10-100 s
Eğitimde maksimum döngü sayısı	200
Eğitim Algoritması	Levenberg-Marquardt

Sistem tanımlama aşaması Çizelge 7.2'deki parametrelerle gerçekleştirildikten sonra artık tepkime kabının kontrolüne geçilebilir. Benzetimde kullanılan kontrol parametreleri Çizelge 7.3'te verilmiştir.

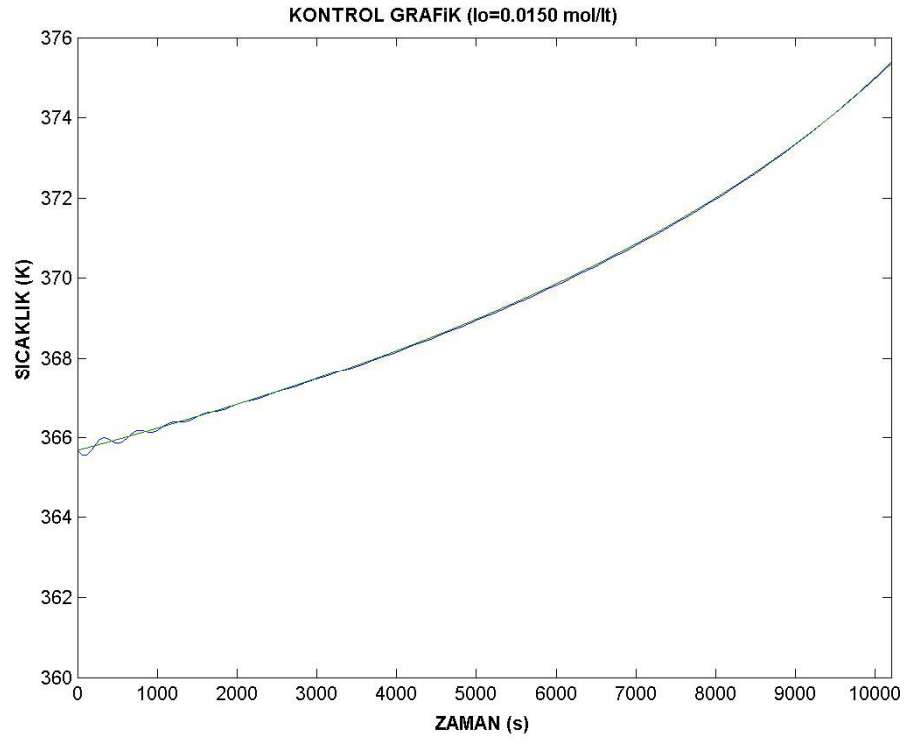
Çizelge 7.3 YSA Model Öngörülü Kontrol Edici Parametreleri

Optimizasyon Ufku (N_2)	2
Kontrol Ufku (N_u)	2
Kontrol Ağırlık Faktörü (α)	0.01
Tarama Parametresi (a)	0.001
Bir örnekleme aralığındaki iterasyon sayısı	2

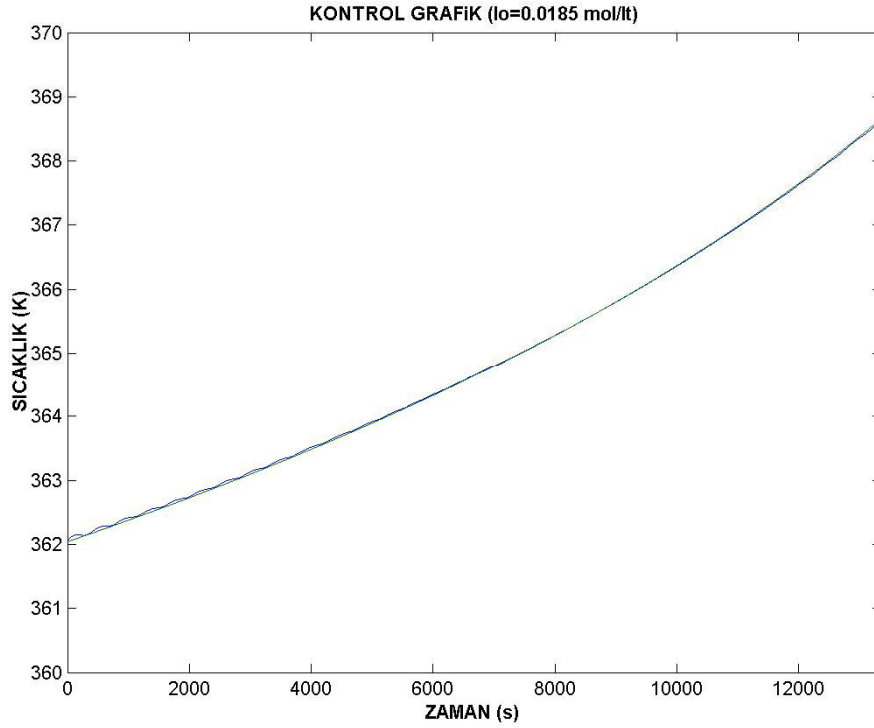
Bölüm 7.1.1'de verilen optimum sıcaklık minimum zaman profillerinde polimerleşme tepkimesi kontrol edilmiş ve elde edilen sonuçlar Şekil 7.7-9'da verilmiştir.



Şekil 7.7 Reaktör sıcaklığının, optimum sıcaklık profilinde YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0125$ mol/l)



Şekil 7.8 Reaktör sıcaklığının, optimum sıcaklık profilinde YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0150$ mol/l)



Şekil 7.9 Reaktör sıcaklığının, optimum sıcaklık profilinde YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0185$ mol/l)

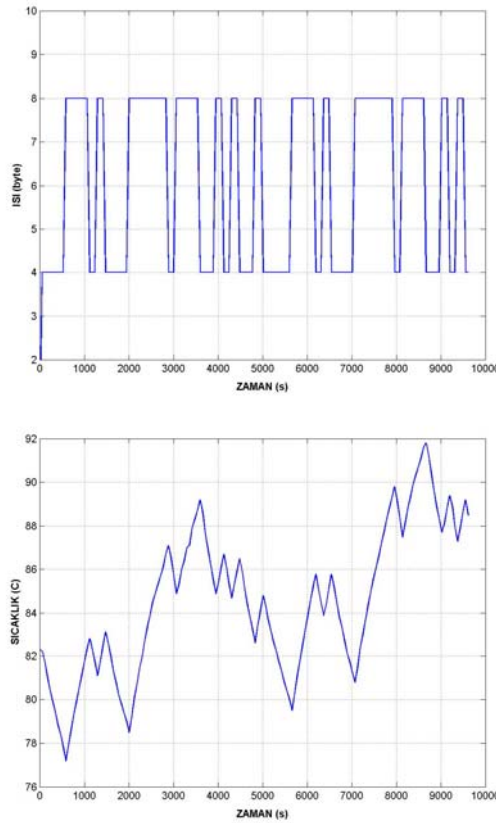
Çizelge 7.4 Üç farklı başlatıcı başlangıç derişimi ve optimum sıcaklık profilinde gerçekleştirilen kontrol ile elde edilen benzetim sonuçları

No	M_0 (mol/l)	I_0 (mol/l)	t_f (sn)	Dönüşüm	M_n (g/mol)
1	6.092	0.0125	7620	0.45	45814
2	6.092	0.0150	10200	0.48	43096
3	6.092	0.0185	13320	0.52	40033

Tepkime dinamiğinin çıktıları (Çizelge 7.1) ile kontrol ile elde edilen çıktılar (Çizelge 7.4) karşılaştırıldığında monomer dönüşümünde her üç koşul için de yaklaşık %12'lik bir artış görülmektedir. Yine kontrol sonucu elde edilen polimerin molekül ağırlığında da dinamik çıktılarına göre artış sağlanmıştır. Teorik kontrol çalışmalarında istenilen optimum dönüşüm ve molekül ağırlığına ulaşıldığı gözlemlenmiştir.

7.2 Kontrolün Deneysel Olarak Sağlanması

Deneysel çalışmalarda öncelikle kontrol yönteminin başarımı su deneyleri yapılarak gözlenmiş ve kontrol ayar parametresinin performans üzerine etkisi incelenmiştir. Su deneyleri polimer deneylerine başlamadan önce yapılan ön deneylerdir. Bu deneylerde kontrol algoritmasının etkinliği çok sayıda tekrar yaparak denir, gerekli parametreler ayarlanır. Deney düzeneği Bölüm 4.1’de gösterildiği gibi polimer deneylerinde kullanılan düzeneğin aynısıdır. Ancak, su deneylerinde tepkime kabının içine monomer yerine musluk suyu koyulur, polimer deneyinde inert ortamı sağlamak için gönderilen azot da su deneylerinde kullanılmaz. Böylece kimyasallar da idareli kullanılarak ziyan edilmemiş olur. Su deneyinde de kontrol aşamasına geçmeden önce sistem tanımlama işlemi gerçekleştirilir. Bunun için öncelikle deney sistemine PRBS tipinde ısı etkisi verilerek sistemin sıcaklığı ölçülmüştür.



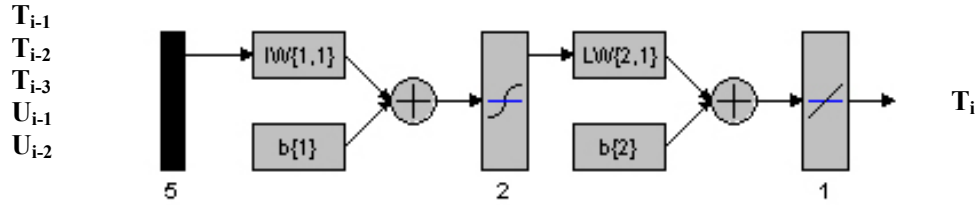
Şekil 7.10 PRBS yük etkisi altında sistem girdi-çıkı verileri

Elde edilen bu veriler ile YSA eğitilerek tepkime kabının dinamiğini temsil edecek bir model oluşturulmuştur.

YSA'nın eğitiminde 5 Giriş, 1 Hedef vardır. Aktivasyon fonksiyonu tansig(x)'dir.

Girişler (T_{i-1} , T_{i-2} , T_{i-3} , U_{i-1} , U_{i-2})

Hedef (T_i)



Şekil 7.11 Oluşturulan YSA'nın şeması

$IW\{1,1\}$ ve $LW\{2,1\}$ ile gösterilen ağırlık değerleri ile $b\{1\}$ ve $b\{2\}$ ile gösterilen eşik (bias) değerleri Levenberg-Marquardt geri yayılım algoritması ile MATLAB®'da hesaplanmıştır. Bu değerlerin hesaplanmasıyla YSA modeli belirlenmiş olur. Şekil 7.11'de görüldüğü gibi YSA modelinde gizli katmanda iki nöron bulunmaktadır.

Çizelge 7.5 Su deneyi sistemi YSA Modelinin Ağırlık ve Bias değerleri

IW{1,1}	LW{2,1}	b{1}	b{2}
-0.050133	-3.1006	7.6499	86.649
-0.41258			
-0.010156			
8.735			
-0.17189			
-11.0582	0.4397	-53.3993	
8.9414			
3.3398			
5.8753			
-5.7085			

Çizelge 7.5'te su deneylerinden elde edilen ısı-sıcaklık verileri kullanılarak MATLAB®'da eğitilen YSA'nın ağırlık ve bias değerleri verilmektedir.

YSA model öngörülü kontrol, bir adım ötesini tahmin için YSA modelini kullanır. Kontrol işlemi, YSA modeline dayanarak maliyet fonksiyonunun (7.3), doğrudan optimizasyonu ile gerçekleştirilir.

$$J = [r(t+1) - y_m(t+1)]^2 + \alpha [\Delta u(t)]^2 \quad (7.3)$$

Yukarıdaki denklemde $\alpha > 0$ olmak üzere kontrol ağırlık faktörü, $\Delta u(t) = u(t) - u(t-1)$ ve $y_m(t+1)$ YSA modelinin bir adım ilerisi için tahmin ettiği çıktıdır. Kontrol edicinin $y_m(t+1)$ değerini bir adımda istenen $r(t+1)$ değerine getirmesi çok fazla kontrol eforu isteyebilir. İyi bir kontrol ile kontrol eforunun değişimi arasında uzlaşma sağlamak için maliyet fonksiyonunun optimizasyonunda $\alpha \neq 0$ kabul edilmiştir.

YSA modeli yukarıda oluşturulmuştu. Doğrusal olmayan prosesin dinamik modeli olan üç katmanlı YSA'yı kullanarak, maliyet fonksiyonunun optimizasyonu aşağıdaki gibi gerçekleştirilmiştir.

$$u(t) = u(t-1) - \frac{\lambda}{1 + \alpha\lambda} e(t+1) \frac{\partial e(t+1)}{\partial u(t)} \quad (7.4)$$

Bu denklemde $\lambda > 0$ optimizasyon adımıdır. $e(t+1) = r(t+1) - y_m(t+1)$ 'dir.

Sistem tanımlama bölümünde açıklandığı gibi oluşturulan YSA'nın matematiksel ifadesi (7.5)'te verilmiştir.

$$y_m(t+1) = \sum_{i=1}^H w_i s(\cdot) \quad (7.5)$$

$$s(\cdot) = \sum_{j=1}^n w_{ij} y_m(t-j+1) + \sum_{j=1}^m w_{i,n+j} u(t-j+1) \quad (7.6)$$

Hassaslık olarak ifade edilebilecek $\partial e(t+1)/\partial u(t)$, YSA modelinden şu şekilde çıkartılabilir:

$$\frac{\partial e(t+1)}{\partial u(t)} = -\sum_{i=1}^H w_i s'(\cdot) w_{i,n+1} \quad (7.7)$$

Eğitim sonucunda hesaplanan ağırlık ve eşik (bias) değerleri yerleştirildiğinde elde edilen YSA modelinin matematiksel ifadesi (7.8-10)'da verilmiştir.

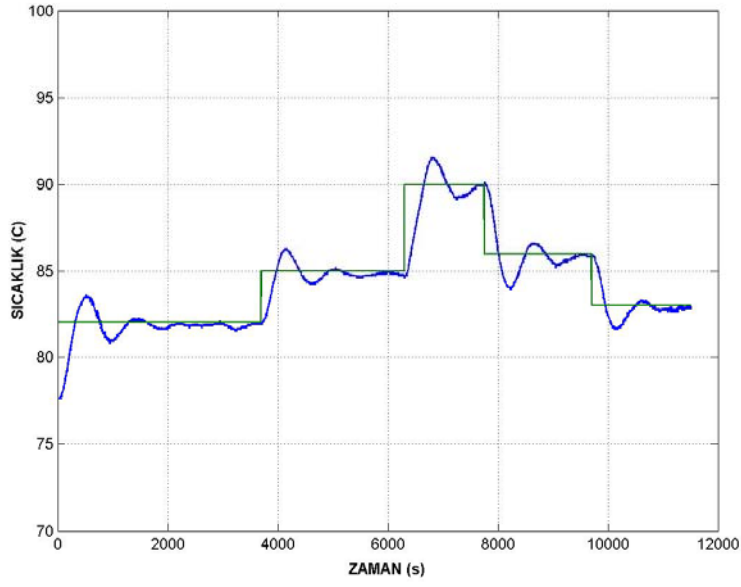
$$N_1 = w_{11}T_{i-1} + w_{12}T_{i-2} + w_{13}T_{i-3} + w_{14}U_{i-1} + w_{15}U_{i-2} + b1 \quad (7.8)$$

$$N_2 = w_{21}T_{i-1} + w_{22}T_{i-2} + w_{23}T_{i-3} + w_{24}U_{i-1} + w_{25}U_{i-2} + b2 \quad (7.9)$$

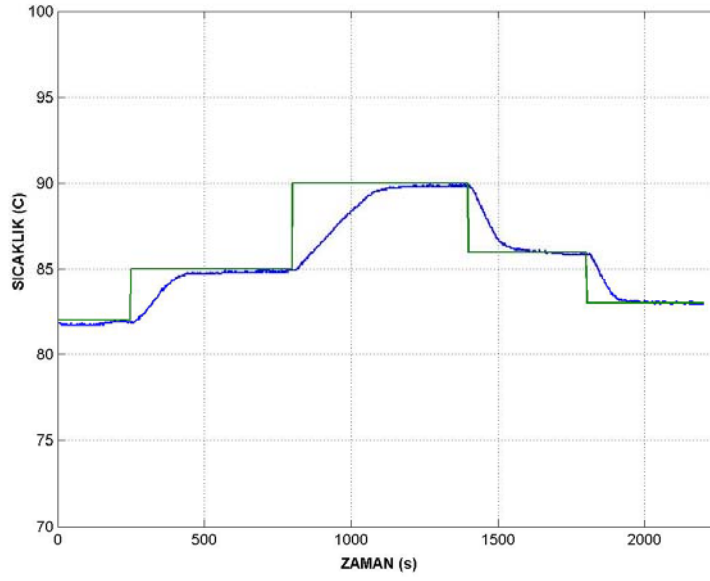
$$T_i = w_1 \left(\frac{2}{1 + \exp(-2N_1)} - 1 \right) + w_2 \left(\frac{2}{1 + \exp(-2N_2)} - 1 \right) + b \quad (7.10)$$

Denklem (7.10)'da verilen YSA modeli tarafından tahmin edilen sıcaklık değerine dayanılarak maliyet fonksiyonunun optimizasyonu ile kontrol davranışı hesaplanmakta ve sisteme gönderilmektedir.

Eğitilen YSA'nın ağırlık ve bias değerleri alınıp YSA model öngörülü kontrol algoritması visual basic dilinde yazılmıştır. Ardından set noktasına basamak etki verilerek farklı ayar parametrelerinde kontrol yapılmıştır. Elde edilen sonuçlar Şekil 7.12 ve 7.13'te verilmiştir.



Şekil 7.12 $\frac{\lambda}{1+\alpha\lambda} = 0.1$ iken set noktasına basamak etkiler verilerek yapılan deneysel kontrol sonucu

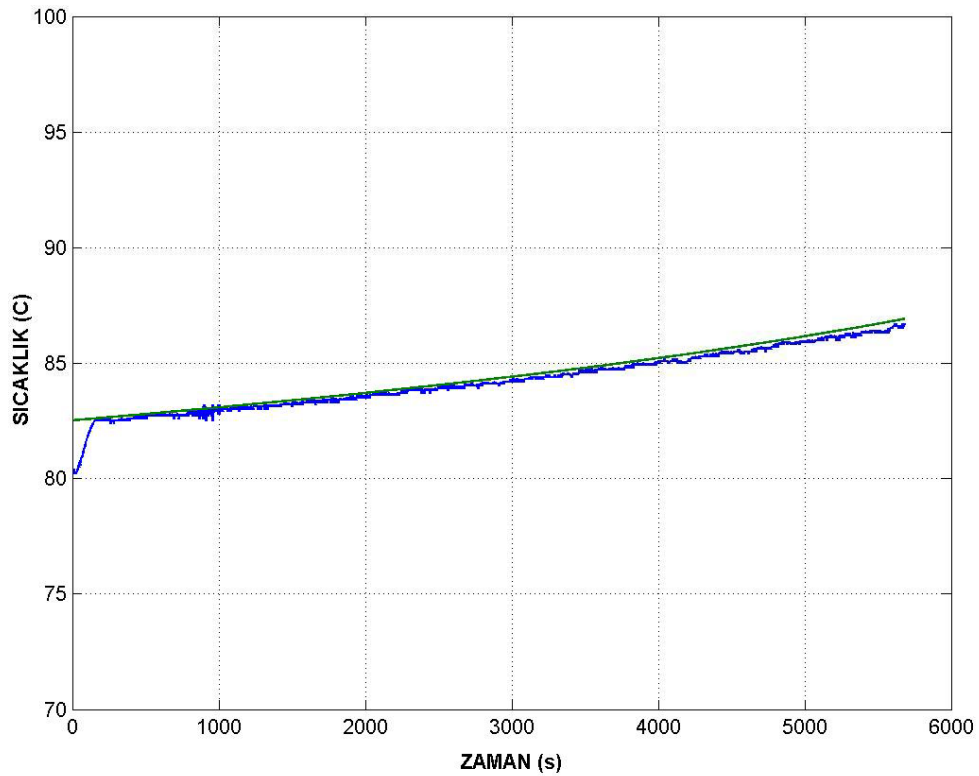


Şekil 7.13 $\frac{\lambda}{1+\alpha\lambda} = 5$ iken set noktasına basamak etkiler verilerek yapılan deneysel kontrol sonucu

Şekillerden de görüldüğü gibi, katsayı 5'e eşit olduğunda gerçekleşen kontrol daha hızlıdır ve salınım yoktur. Polimer deneylerinde bu katsayı kullanılmıştır.

Kontrol üzerinde etkisi olan sabitler, su deneyleri tekrarlanarak, en doğru deęerleri alacak şekilde belirlendikten sonra polimer deneylerine geilmiřtir.

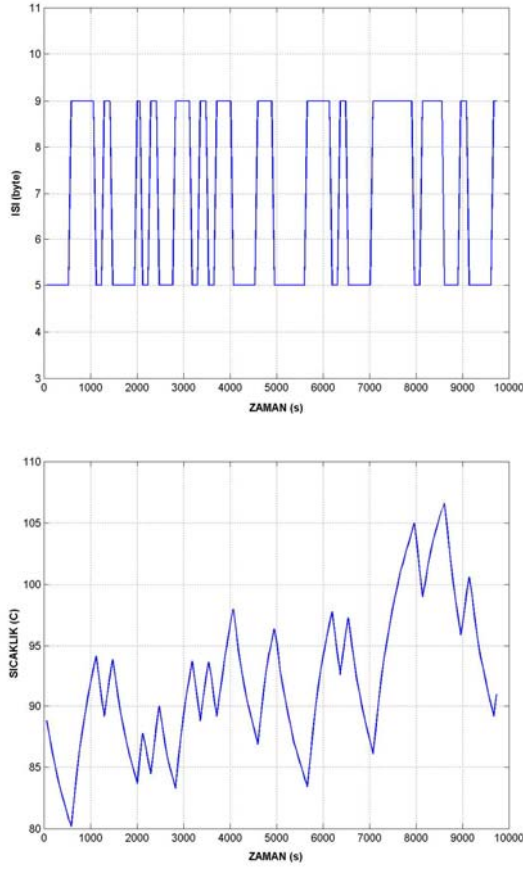
Polimer deneylerine gemeden nce oluřturulan kontrol algoritmasının deęiřken sıcaklık profilinde kontrol bařarıyla saęlayıp saęlamadıęını kontrol edebilmek amacıyla bir su deneyi yapılmıřtır. Elde edilen sonu řekil 7.14'te verilmiřtir.



řekil 7.14 Deęiřken set noktası verildięinde reaktr sıcaklıęının zamanla deęiřimi (su deneyi)

7.2.1 Polimer reaktr sıcaklıęının deneysel kontrol

Polimerleřme tepkimesi suyun kaynadıęı sıcaklıęın stndeki sıcaklıklarda gerekleřtięi iin ve tepkime kabı ierisindeki kimyasallardan dolayı farklı bir termodinamięe sahip olduęu iin, su deneylerinde kullanılan model burada kullanılamaz. Tepkime kabının dinamięini yansıtacak yeni bir model geliřtirilmesi gereklidir. Yani yeni aęırlık deęerlerinin hesaplanması gerekmektedir. Bunun iin tepkime kabının iine stiren ve toluen koyulduktan sonra ısıtılarak, veriler tekrar alınmıřtır.



Şekil 7.15 Polimer için PRBS yük etkisi altında sistem girdi-çıkı verileri

Şekil 7.11’de gösterilen mimariye sahip YSA modeli, bu kez Şekil 7.15’teki verilere dayanılarak tekrar oluşturulmuş, yani ağırlık ve bias değerleri tekrar hesaplanmış, ardından polimerleşme tepkimesinin kontrolüne uygulanmıştır. Polimer deneylerinden elde edilen ısı-sıcaklık verileri kullanılarak MATLAB®’da eğitilen YSA’nın ağırlık ve bias değerleri Çizelge 7.6’da verilmektedir.

Çizelge 7.6 Polimer deneyi sistemi YSA Modelinin Ağırlık ve Bias değerleri

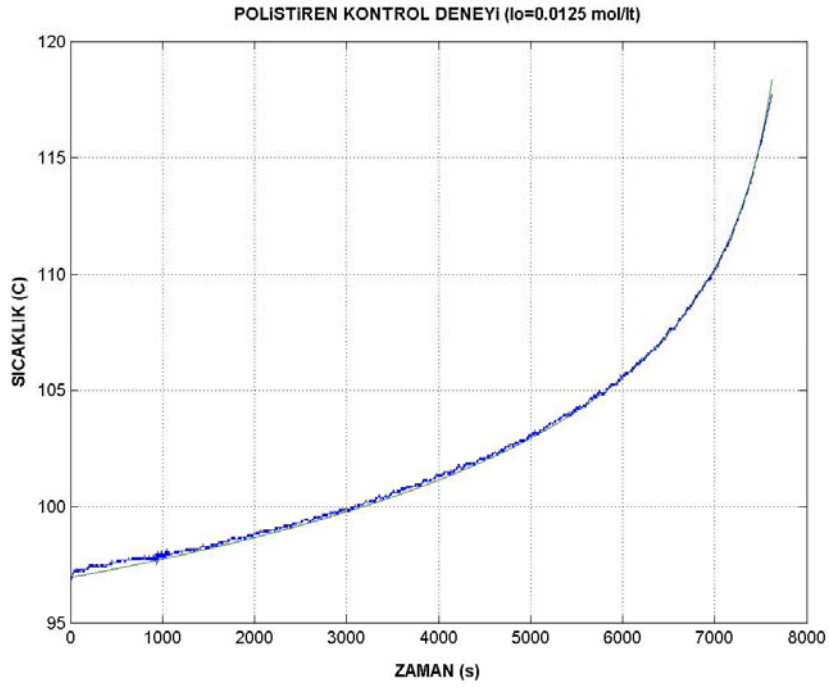
IW{1,1}	LW{2,1}	b{1}	b{2}
-0.020209	-71.0043	1.3569	95.5491
0.0081864			
-0.001663			
-0.009824			
0.0039121			
3.5582	-0.50827	-88.402	
-40.5218			
35.4169			
9.2695			
0.50177			

YSA Modeli oluşturulduğuna göre artık polimerleşme tepkimesinin kontrolüne geçilebilir. Değişken sıcaklık profillerinde gerçekleştirilen kontrol ile elde edilen sonuçlar Şekil 7.16-21'deki gibidir.

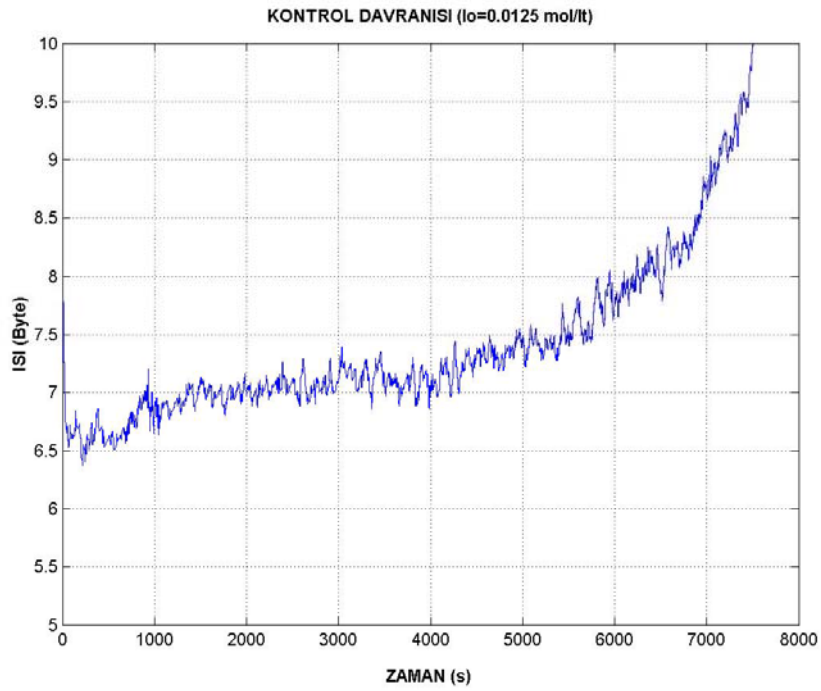
Başlatıcı derişiminin (I_0) 0.0125 mol/lit olduğu polistiren kontrol deneyi Şekil 7.16'da gösterilmektedir. Kullanılan üç optimum sıcaklık profili içinde en dik sıcaklık profiline sahip olan bu kontrol çalışmasında reaktör sıcaklığının set profilini çok ufak salınım ile takip ettiği gözlenmiştir. Bu kontrol çalışması sırasında ayarlanabilen değişken değişimleri Şekil 7.17'de görüldüğü gibidir. Ayar değişkeninin kontrol performansına çok uyumlu bir değişim içinde olduğu gösterilmiştir.

Başlatıcı derişiminin (I_0) 0.0150 mol/lit olması koşulunda set profilinde yumuşak bir yükselme bulunmaktadır. Bu koşulda reaktör sıcaklığı deneysel kontrol ile set profilini başarılı bir şekilde takip etmiştir. Ayar değişkeninin zamanla değişimleri Şekil 7.19'da görüldüğü gibi kontrol edilen değişken değişimleri ile uyum içinde bir seyir takip etmiştir.

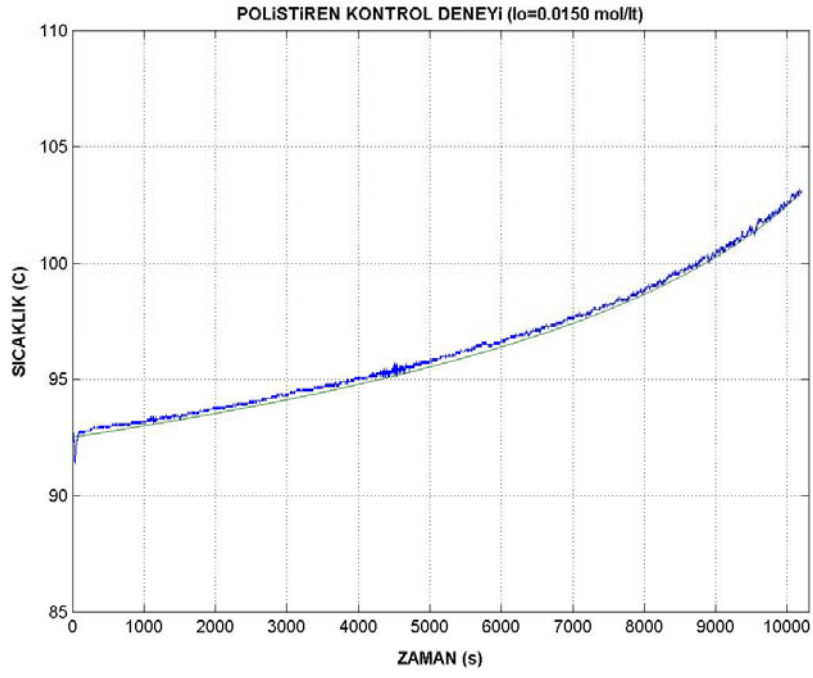
Başlatıcı derişiminin (I_0) 0.0185 mol/lit olduğu 13320 saniyelik kontrol deneyi Şekil 7.20'de verilmektedir. Sıcaklık kontrolünün çok başarılı olduğu gözlenmiştir. Ayar değişkeninin zamanla değişim profili Şekil 7.21'de verildiği gibidir.



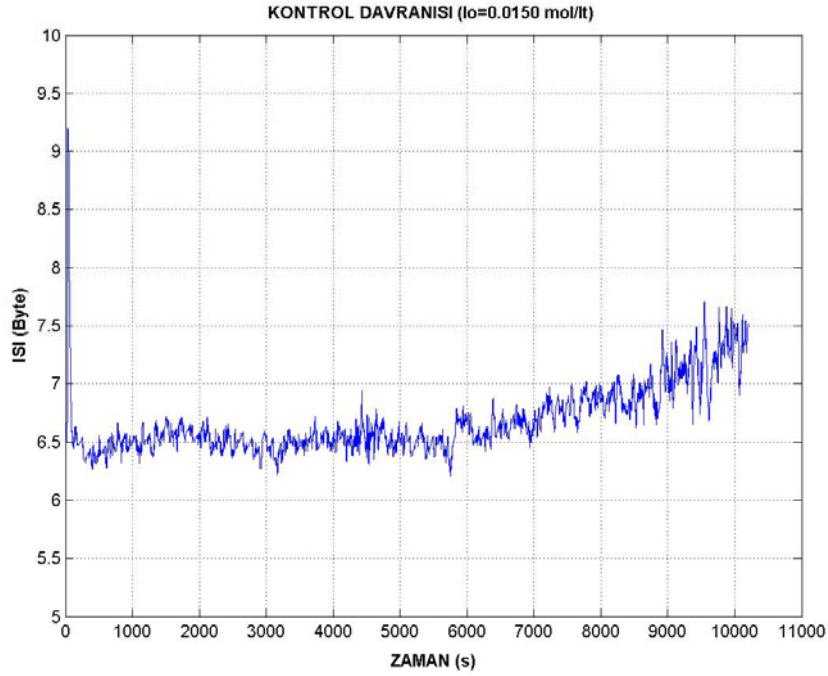
Şekil 7.16 Reaktör sıcaklığının optimum sıcaklık profilinde YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0125$ mol/l)



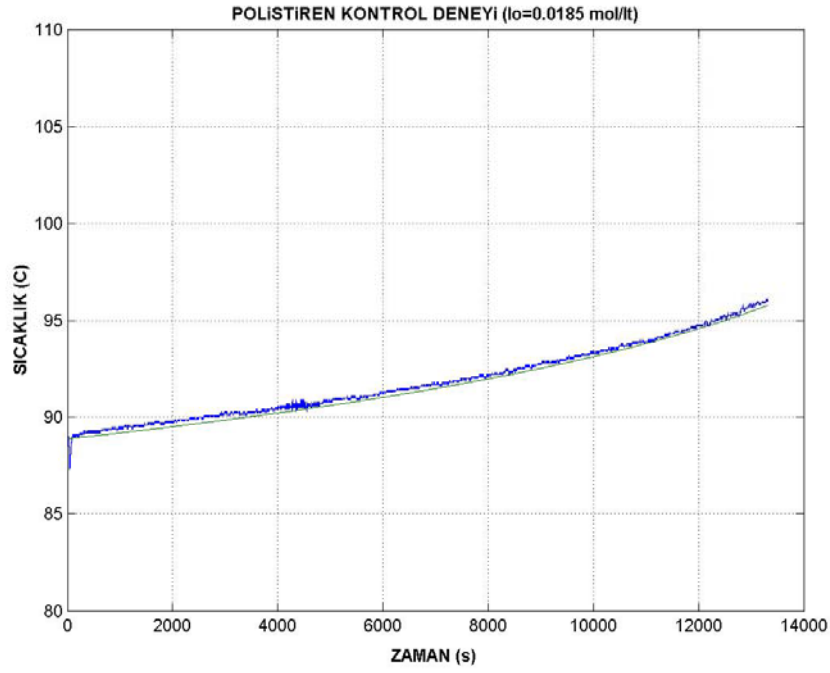
Şekil 7.17 Reaktör sıcaklığının YSA model öngörülü algoritma ile kontrol edildiği durum için ayarlanabilen değişkenin zamanla değişimi ($I_0=0.0125$ mol/l)



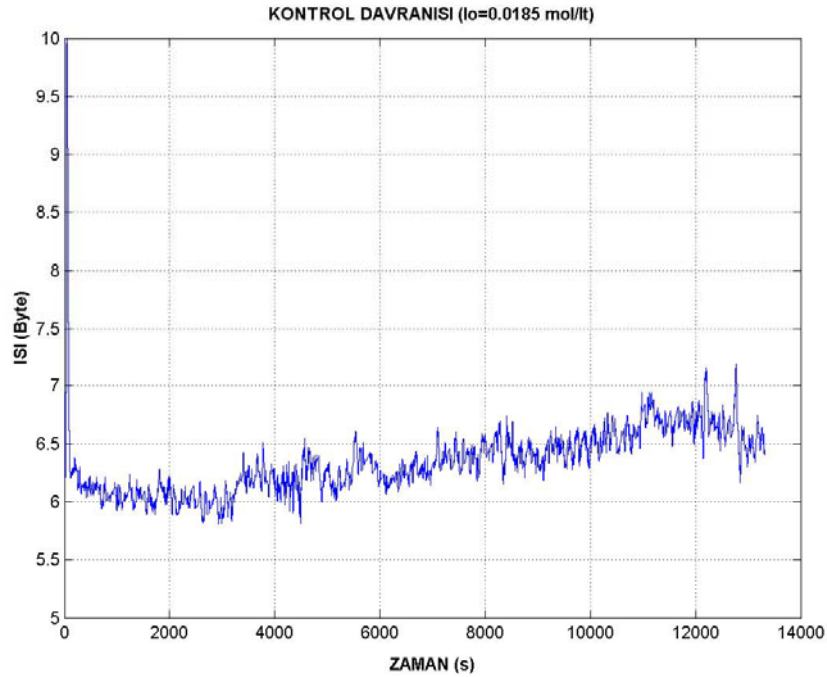
Şekil 7.18 Reaktör sıcaklığının optimum sıcaklık profilinde YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0150$ mol/l)



Şekil 7.19 Reaktör sıcaklığının YSA model öngörülü algoritma ile kontrol edildiği durum için ayarlanabilen değişkenin zamanla değişimi ($I_0=0.0150$ mol/l)



Şekil 7.20 Reaktör sıcaklığının optimum sıcaklık profilinde YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0185$ mol/l)



Şekil 7.21 Reaktör sıcaklığının YSA model öngörülü algoritma ile kontrol edildiği durum için ayarlanabilen değişkenin zamanla değişimi ($I_0=0.0185$ mol/l)

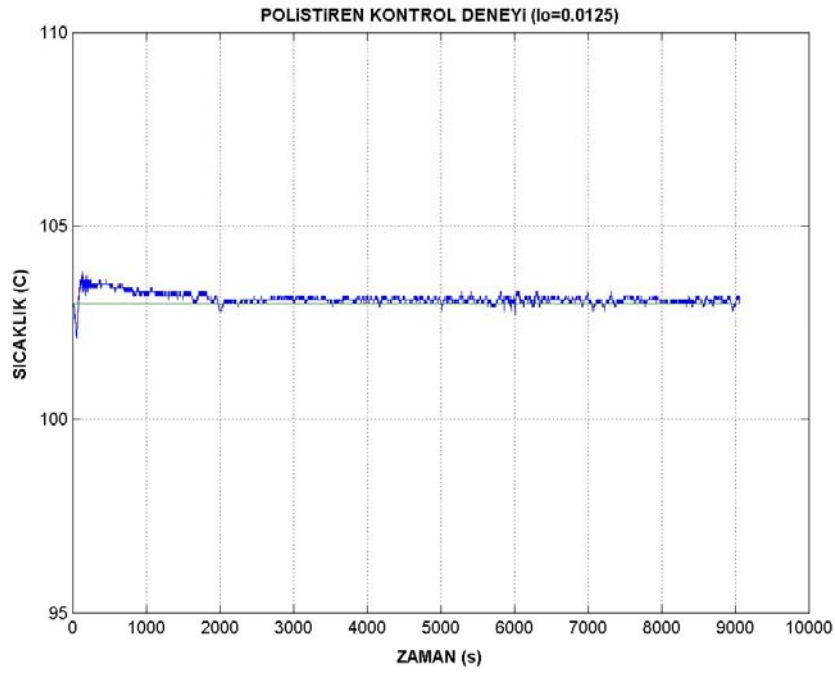
Deney bitiminde alınan numunelerden tartım yapılarak dönüşüm hesaplanmıştır. Molekül ağırlığı tayini TÜBİTAK Ankara Test ve Analiz Laboratuvarı'nda GPC (Gel Permeation Chromatography) ile yapılmıştır. Elde edilen sonuçlar Çizelge 7.7'de verilmektedir.

Çizelge 7.7 Üç farklı başlatıcı başlangıç derişimi ve optimum sıcaklık profillerinde gerçekleştirilen kontrol ile elde edilen deney sonuçları

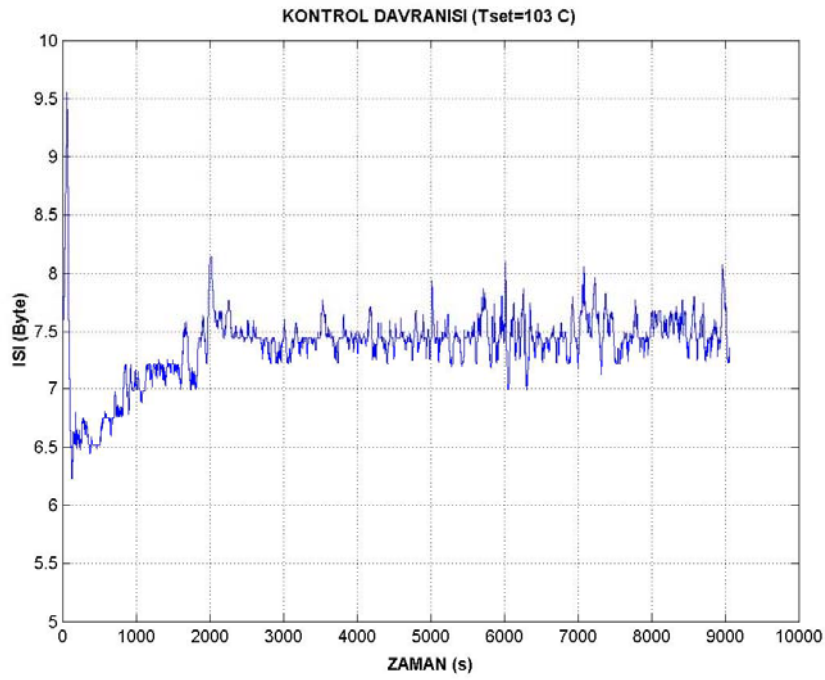
No	M_0 (mol/l)	I_0 (mol/l)	t_f (sn)	Dönüşüm	M_w (g/mol)
1	6.092	0.0125	7620	0.63	51739
2	6.092	0.0150	10200	0.66	56215
3	6.092	0.0185	13320	0.70	58214

Deneysel sonuçlar incelendiğinde, açık hat benzetim sonucunda elde edilen molekül ağırlığından daha yüksek bir molekül ağırlığına kontrol deneyi sonucunda ulaşıldığı görülmektedir. Çalışmanın amacı olan 52000 g/mol ağırlığındaki polimere deneyler sonucunda yaklaşık ulaşıldığı görülmektedir.

Kontrol algoritmasının başarımı sabit sıcaklıkta da test edilmiştir. Yapılan deney sonucunda elde edilen grafik Şekil 7.22'de verilmiştir.



Şekil 7.22 Reaktör sıcaklığının sabit set noktasında YSA model öngörülü kontrolü ($I_0=0.0126$, $T_{set}=103\text{ }^{\circ}\text{C}$)



Şekil 7.23 Reaktör sıcaklığının YSA model öngörülü algoritma ile kontrol edildiği durum için ayarlanabilen değişkenin zamanla değişimi ($I_0=0.0126\text{ mol/l}$, $T_{set}=103\text{ }^{\circ}\text{C}$)

Çizelge 7.8 Sabit sıcaklıkta gerçekleştirilen kontrol ile elde edilen deney sonuçları

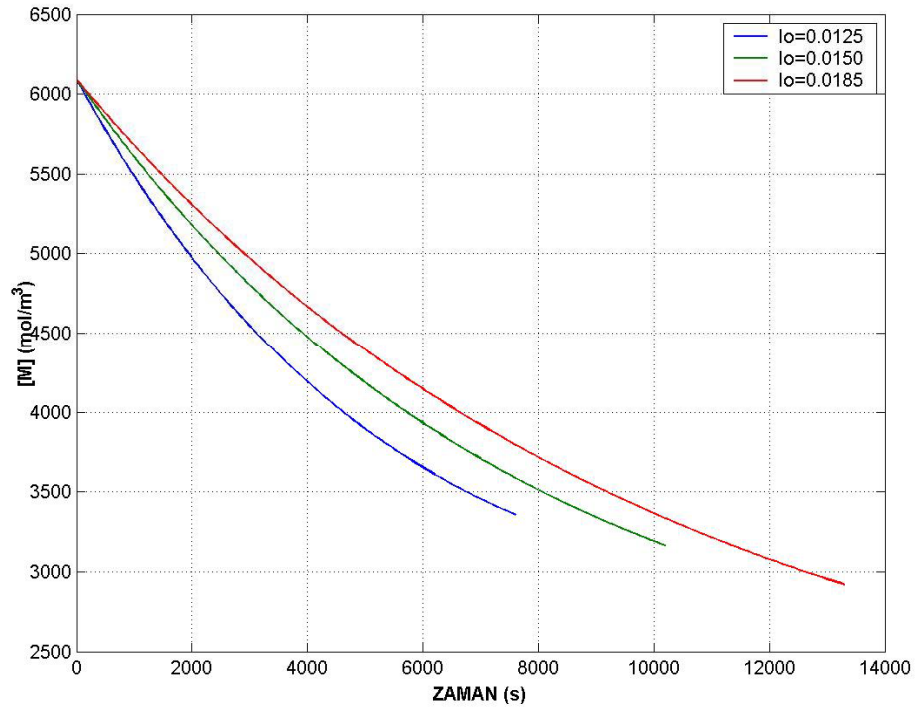
T_{set} (°C)	M_0 (mol/l)	I_0 (mol/l)	t_f (sn)	Dönüşüm	M_w (g/mol)
103	6.092	0.0126	9060	0.68	51142

Sabit sıcaklık ve optimum zamanda yapılan kontrol sonucunda ulaşılmak istenen 52000 g/mol ağırlığına yaklaşık ulaşıldığı Çizelge 7.8’de görülmektedir.

7.3 Monomer Dönüşümünün Teorik Olarak Tahmini

Tepkime sırasında doğrudan ölçülemeyen monomer dönüşümünün tepkime boyunca tahmin edilmesi önem kazanmaktadır. Tepkimenin belirli bir anındaki monomer derişimi değeri, bize o andaki monomer dönüşümü değerini de vereceğinden monomer derişiminin tahmin edilmesi gereklidir.

Üç değişik optimum işletim şartı için monomer derişiminin zamanla değışimi Şekil 7.24’te verilmiştir. Tepkime boyunca monomer derişiminin aldığı değeri bu grafikten okunabileceği gibi, bu üç eğrinin tümünü kapsayan veriler ile eğitilmiş radyal tabanlı fonksiyon ağı tarafından da hesaplanabilir.

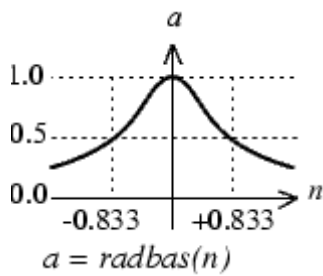


Şekil 7.24 $I_0=0.0125$ mol/l, $I_0=0.0150$ mol/l ve $I_0=0.0185$ mol/l için tepkime boyunca monomer derişiminin zamanla değışimi

YSA nöronlarında kullanılan aktivasyon fonksiyonu Radyal Tabanlı Fonksiyon olduğunda oluşan ağa Radyal Tabanlı Fonksiyon Ağı (RTFA) denmektedir. Çalışmada kullanılan Radyal Tabanlı Fonksiyon aşağıdakidir.

$$radbas(n) = e^{-n^2} \quad (7.11)$$

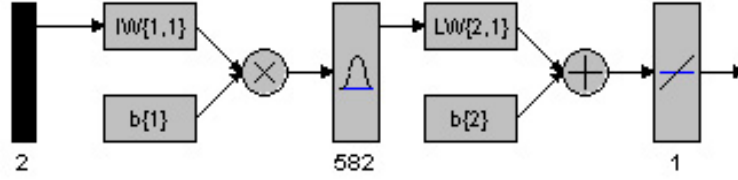
Fonksiyonun grafiksel ifadesi şöyledir.



Şekil 7.25 Radyal Tabanlı Fonksiyon

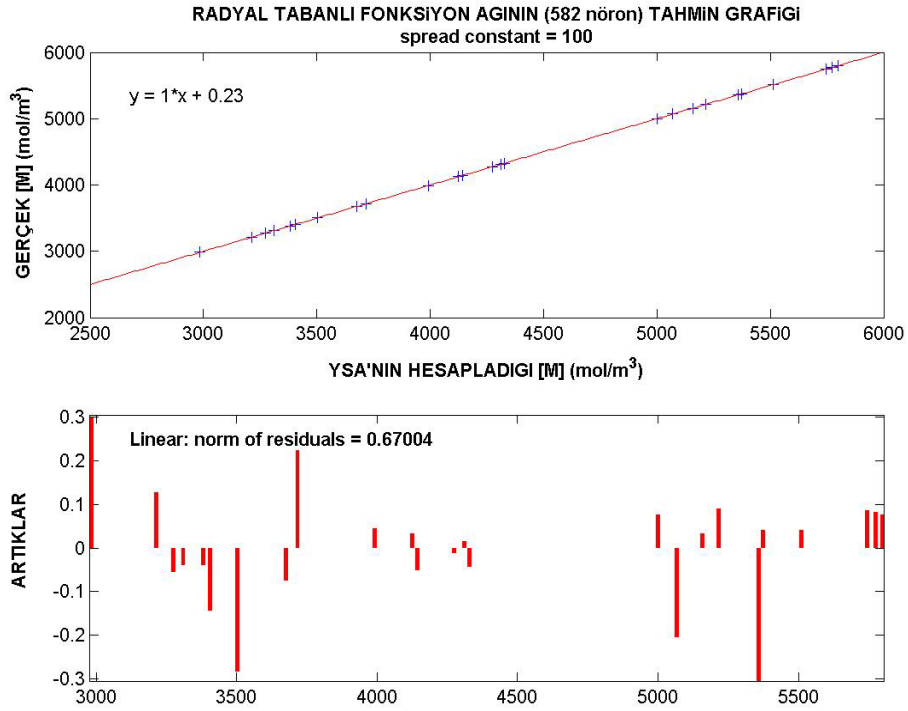
Oluşturulan RTFA'nın girdileri Başlatıcı Başlangıç Derişimi ve Zaman değerleridir. Çıktıları ise ilgili zamandaki Monomer Derişimi değerleridir. Ağın eğitiminde 600 veri kullanılmış, bunlardan farklı 25 veri de ağı test etmek için kullanılmıştır. Eğitimi

durdurma kriteri olarak hata değerinin 0.01'e ulaşması koyulmuştur. RTFA'nın eğitiminde her döngüde ağı bir nöron eklenmektedir. Bu işlem belirlenen eğitimi durdurma kriterine ulaşıncaya kadar devam etmektedir. Bu çalışmada kritere ulaşmak için bir gizli katmanda 582 Radyal Tabanlı Nöron kullanılmıştır.



Şekil 7.26 RTFA Mimarisi

RTFA'nın başarımında etkili olan önemli bir faktör de dağılım sabitidir. Dağılım sabiti, RTFA'nın girdi alanının üst üste binen bölümlerine iyi cevap verebileceği kadar büyük olmalı; ancak bütün girdi alanına aynı biçimde yanıt vermemesi için çok büyük olmamalıdır. Bu sabitin en uygun değeri deneme yanılma ile bulunmuştur. Test verileri ağı girildiğinde elde edilen tahmin sonuçları Şekil 7.27'de görüldüğü gibi oldukça başarılıdır.



Şekil 7.27 Test verileri kullanıldığında RTFA tarafından tahmin edilen Monomer Derişimi değerleri ile gerçek Monomer Derişimi değerlerinin karşılaştırılması.

7.4 Polimer Reaktörü Modellerinin Karşılaştırılması

Çalışılan polimer reaktörünün üç değişik modelinin birbirleri ile karşılaştırılması modellerin geçerliliğinin öğrenilmesi bakımından faydalıdır. Bu üç model şunlardır; belirli varsayımlar altında oluşturulan kütle ve enerji denkliklerinin çözümü ile elde edilen Analitik Model, Analitik Model'den benzetim ortamında alınan ısı-sıcaklık verileri ile oluşturulan Teorik YSA Modeli ve deneysel ısı-sıcaklık verileri ile oluşturulan Deneysel YSA Modeli.

Analitik model, Bölüm 5'te anlatılmış ve çözümünde elde edilen sıcaklık-zaman grafiği Şekil 7.2'de verilmişti. Bu bölümde diğer iki model incelenmiş ve karşılaştırması yapılmıştır.

7.4.1 Teorik YSA modeli

Tepkime kabının teorik YSA modelinin belirlenmesi için iki girdili, bir çıktılı, aktivasyon fonksiyonu olarak radyal tabanlı bir fonksiyon kullanan Şekil 7.28'deki

Yapay Sinir Ağı oluşturulmuştur. Ağı oluşturulması için gereken veriler analitik modelin çözümünden benzetim ortamında alınmıştır.

Girdiler: T_{i-1} , T_{i-2}

Çıktı: T_i

Eğitimde kullanılan veri sayısı: 205

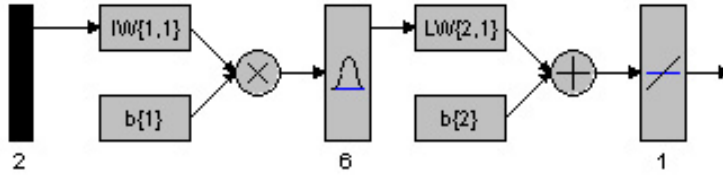
Test için kullanılan veri sayısı: 103

Aktivasyon Fonksiyonu: $\text{radbas}(n) = e^{-n^2}$

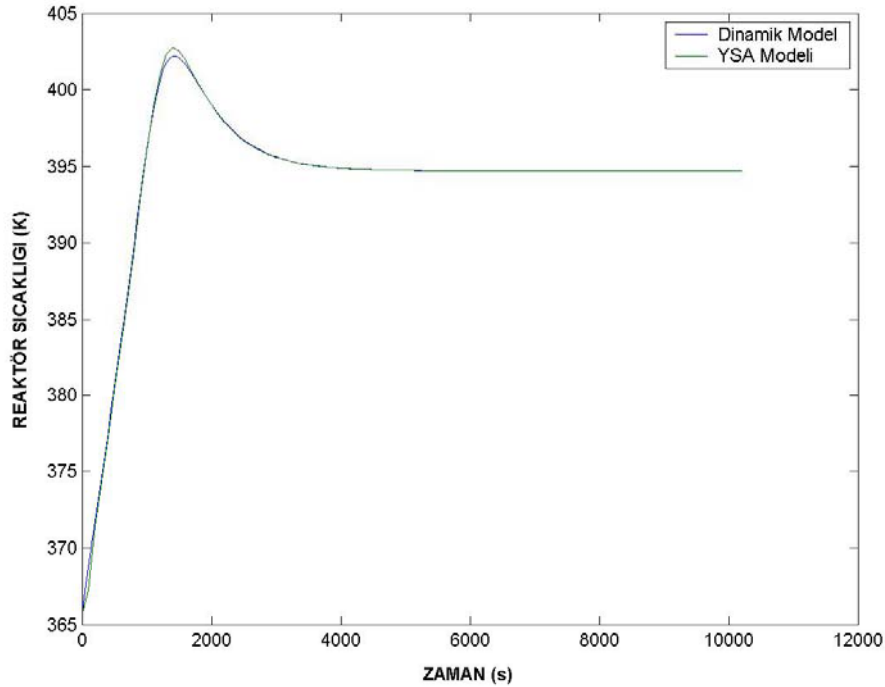
Dağılım Sabiti: 100

Gizli Katman Sayısı: 1

Gizli Katmandaki Nöron Sayısı: 6



Şekil 7.28 Tepkime kabı dinamik modeli için kullanılan YSA'nın mimarisi

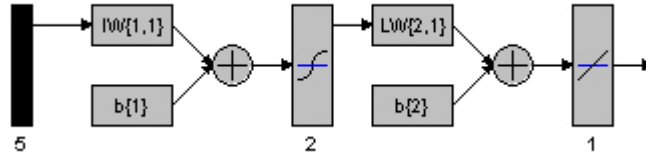


Şekil 7.29 Analitik Model ile hesaplanan Reaktör sıcaklığının YSA Modeli ile hesaplanan Reaktör sıcaklığı ile karşılaştırılması. ($I_0=0.0150$ mol/l)

Teorik YSA Modeli çıktısı ile Analitik Model çıktısı Şekil 7.29’da karşılaştırmalı olarak verilmiştir. YSA Modeli tepkime kabı dinamiğini başarıyla temsil etmektedir.

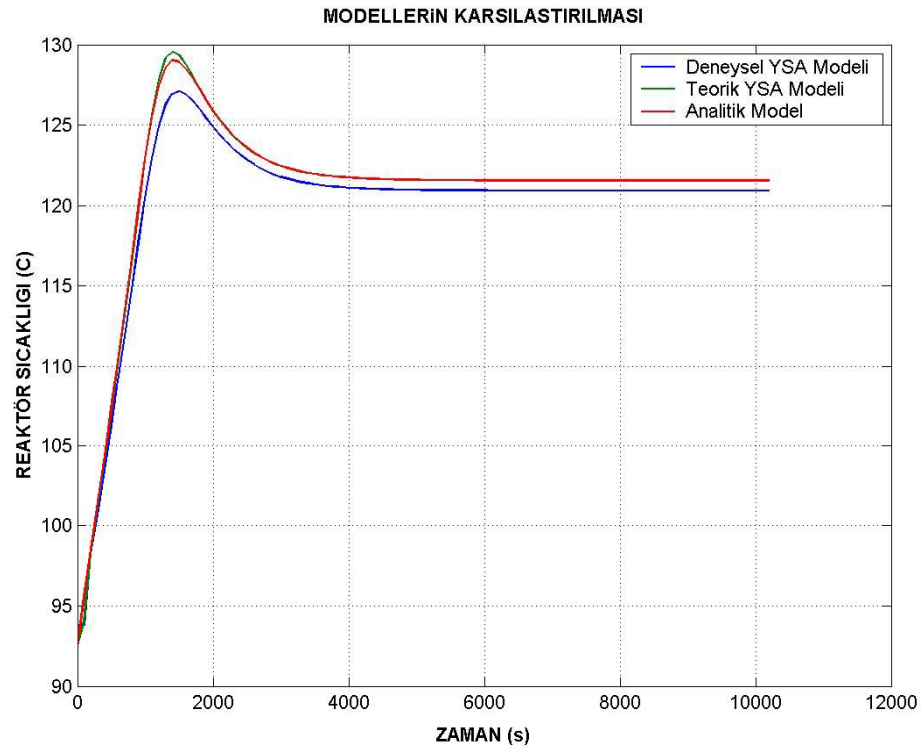
7.4.2 Deneysel YSA modeli

Bölüm 7.2.1’de polimer için deneysel verilerle oluşturulan YSA modelinin sistem dinamiğini iyi temsil edip etmediğini test etmek açısından bir karşılaştırma yapmak doğru olacaktır.



Şekil 7.30 Deneysel veriler ile eğitilen YSA. (Şekil 7.11’deki ağın aynısı)

Deneysel veriler ile daha önce oluşturduğumuz bu YSA Modelinin sistemin dinamiğini doğru temsil edip etmediğini görmek için Analitik model ve Teorik YSA modeli ile karşılaştırılması aşağıda verilmiştir. Deneysel YSA’nın tahmin etmesi için gereken girişler Teorik YSA ve Analitik Model’de kullanılan giriş sıcaklıkları alınmıştır. Deneysel YSA’nın tahmin yapması için gereken Isı (Q) değeri 10 Byte (53.54 cal/sn teorikte) olarak kabul edilmiştir. Giriş değerlerine göre Deneysel YSA’nın yaptığı tahminlere bakıldığında sistemin dinamiğinin her üç model tarafından da birbirine çok yakın olarak modellendiği Şekil 7.31’de görülmektedir. Bu olgudan hareketle, hem teorik modellerin deneysel veriler ile çelişmediği hem de deneysel modelin analitik model ile çelişmediği söylenebilir.



Şekil 7.31 Analitik model, teorik YSA modeli ve deneysel YSA modelinin karşılaştırılması

DeneySEL model ile teorik modellerin arasındaki yaklaşık 1.8 °C'lık farkın kaynağı deney sistemindeki ısıtıcı kısıtlamasıdır. Isıtıcının yanmaması için gönderebileceğimiz en yüksek değer olan 10 Byte'ta sınırlama getirilmiştir.

8. TARTIŞMA ve SONUÇ

Bu çalışmada, polistiren reaktörünün sıcaklık kontrolü için hızlı ve güçlü bir kontrol sistemi geliştirmek ve deneysel olarak uygulamak amaçlanmıştır. Oluşturulan Yapay Sinir Ağı Model Öngörülü Denetici ile kontrol edilen polimerleşme tepkimesinin sonucunda istenilen değere yakın molekül ağırlığına sahip polistiren deneysel ve teorik olarak elde edilmiştir.

Dinamik sistemi iyi temsil eden bir YSA modeli oluşturulmuş ve kontrol başarıyla sağlanmıştır. YSA modellerinin gücü hızlı oluşturulmalarında ve uyarlanabilir olmalarındadır. Bununla beraber karmaşık matematiksel modelleri de en iyi şekilde temsil edebilecekleri Bölüm 6.4'te karşılaştırmalı olarak gösterilmiştir.

Polimerleşme tepkimelerinde tepkime sürerken doğrudan ölçülmesi zor olan monomer derişimi değerini tahmin etmek için bir Radyal Tabanlı Fonksiyon Ağı oluşturulmuştur. Yapılan benzetim çalışmalarında oluşturulan ağın tepkimenin herhangi bir anındaki monomer derişimi değerini, dolayısıyla dönüşüm yüzdesini, başarıyla tahmin ettiği gösterilmiştir.

Çıkarılması uzun ve zor hesaplamalar gerektiren gerçek matematiksel modellerin yerine YSA modellerinin sistem tanımlama ve kontrol çalışmalarında kullanılan güçlü araçlar oldukları bu çalışma ile tekrar kanıtlanmıştır. Bu bağlamda YSA modellerinin güçlü yönleri başlıca şunlardır:

- Sonuçların yüksek güvenilirlikte olması sebebiyle geleneksel yöntemlere bir alternatif olarak kullanılabilir.
- Analitik modeller oluşturulurken birtakım varsayımlar yapılmaktadır. YSA deneysel verilerden yararlanıldığı için modelin oluşturulması sırasındaki varsayımlardan doğan hataları içermez.
- Yapay sinir ağları hızlı ve basit yapıda olmalarının yanında modellenmesi zor problemlere kabul edilebilen sonuçlar önerebilmektedir.
- Yapay sinir ağları sistem parametrelerindeki değişimlere göre kolayca uyarlanabilir niteliktedirler.

YSA modellerinin öne sürülebilecek bazı dezavantajları ise şunlardır:

- Ampirik modeller oldukları için sistemin içinde ne olduğunu açıklamazlar. Neyin neden gerçekleştiği bilgisini vermezler.
- Rasgele başlangıç ağırlıkları kullanıldığı için her zaman aynı sonucu vermeyebilirler.

Avantajları ve dezavantajları bilinerek bilinçli bir şekilde kullanıldıklarında Yapay Sinir Ağları, modelleme çalışmalarına bir çok yenilik ve kolaylık getiren bir yaklaşım olarak gün geçtikçe önem kazanacaktır.

Çalışmanın deneysel kısmındaki sistem tanımlama işlemi sırasında sisteme PRBS biçiminde ısı etkisi verilmiş ve sistemin dinamik yanıtı ölçülmüştür. Ancak girdi sinyallerinin PRBS tipinde olması şart değildir. Aynı sonuçlara RAS (Random Amplitude Signal) tipi sinyaller ile de ulaşılabilir. Nitekim çalışmanın benzetim kısmında kullanılan MATLAB® programı belirlenen aralıkta RAS sinyalleri ile sistemi tanımlamaktadır. Önemli olan, sistem tanımlama için çalışılan sıcaklık aralığının kontrol deneyinde çalışılacak aralıkla aynı olmasıdır. Ayrıca, eğer yeterli sayıda veri alınmazsa model sistemi iyi temsil etmeyecektir. Aynı şekilde eğer çok fazla sayıda birbirini tekrarlayan veri alınırsa da model ezberleme denilen hataya düşecek ve daha önce karşılaşmadığı girdilere doğru çıktıyı veremeyecektir.

Bu çalışmada karıştırmalı ve soğutma ceketli bir tank reaktörü modellenmiştir. Modellenen sistem bir biyoreaktör olabileceği gibi bir polimer reaktörü veya kesikli çalışan herhangi bir karıştırma kabı da olabilir. Bir başka deyişle bu çalışmada çıkarılan model aynı tipteki bütün tepkime kapları için geçerlidir. Uyarlamak için, modellenecek sistemden ısı-sıcaklık verilerinin alınması ve YSA'nın tekrar eğitilmesi yeterlidir. Bu bağlamda, polistiren üretimi yapan tesislerin tasarımında kontrol sistemleri geliştirilirken kullanılabilecek faydalı bir aracın bu çalışma ile gerçekleştirildiği söylenebilir. Her ne kadar literatürde endüstriyel ölçekteki çalışmalara rastlanmamış

olsa da, bunun bahsedilen yöntemin oldukça yeni olmasından kaynaklandığı tahmin edilmektedir.

Oluşturulan kontrol sisteminin YSA temelli olması sanayi uygulamaları için ayrıca önemlidir. Bu yöntem karmaşık matematiksel çözümler yerine doğrudan giriş-çıkış verilerine dayanarak eğitilen bir ağı kullandığı için oldukça esnektir. Üretim aşamasında, üretimi etkileyecek herhangi bir sabit değer, bir nedenle değiştirilmek istendiğinde, YSA'nın yeni sisteme uydurulması oldukça basit bir işlem olacaktır. Bununla beraber Yapay Sinir Ağı yaklaşımı; kontrol değişkenleri saptanırken yapılan varsayımlardan doğacak hataları da ortadan kaldıracığından üretime doğrudan uygulanabilecek kullanışlı ve güçlü bir yaklaşımdır.

Bu çalışmanın özgünlüğü, yapay sinir ağı temelli model öngörülü kontrolün polistiren üretimine ilk kez uygulanmış olmasıdır. Kaynak araştırması bölümünde de belirtildiği gibi birçok araştırmacı konu ile yakından ilgili çalışmalar yapmıştır. Polistiren üretiminde çeşitli kontrol yöntemleri ve ürün kalitesini artırmaya yönelik çalışmaların yanında başka proseslerle ilgili YSA temelli kontrol çalışmaları da çokça yapılmıştır; ancak bu yöntem bu prosese ilk defa uygulanmaktadır. Öte yandan kaynak araştırma çalışmalarında rastlanan polimerleşme tepkimelerinin ileri kontrolü üzerine yapılan çalışmaların çoğu benzetim programına yani teoriye dayanmaktadır. Bu çalışmanın deneysel ve teorik olması, üstelik optimal koşullarda gerçekleştirilmiş olması literatürdeki bu eksikliğin giderilmesine katkı açısından önemlidir.

Açık literatürde yer alan (Özkan *et al.*, 2006) kontrol deneysel sonuçları ile bu çalışmada gerçekleştirdiğimiz Yapay Sinir Ağı Model Öngörülü Kontrol (NNPMC) kontrol sonuçlarının iki farklı kontrol etkinlik kriteri kullanılarak karşılaştırması Çizelge 8.1'de verilmiştir.

Çizelge 8.1 Kontrol etkinliğinin hata kareleri integrali (ISE) ve hata mutlak değerleri integrali (IAE) kriterlerine göre karşılaştırılması

	LGPC	NLGPC	NNMPC
ISE	1485	135	30
IAE	2150	460	275

ISE kriterine göre yapılan karşılaştırmaya göre, NNMPC etkinliğinin Doğrusal Genelleştirilmiş Öngörülü Kontrol (LGPC) etkinliğinden %97 daha iyi olduğu ve Doğrusal Olmayan Genelleştirilmiş Öngörülü Kontrol (NLGPC) etkinliğinden %77 daha iyi olduğu gözlenmiştir. IAE kriterine göre ise de; NNMPC etkinliğinin LPGC'ye göre %87, NLPGC'ye göre %67 daha iyi olduğu gözlenmiştir (Etike vd. 2008).

KAYNAKLAR

- Akesson, B.M. and Toivonen, H.T. 2006. A neural network model predictive controller. *Journal of Process Control*, 16; 937-946.
- Atasoy, I., Yüceer, M., Ülker, E.O., Berber, R. 2007. Neural Network Based Control of the Acrylonitrile Polymerization Process. *Chemical Engineering & Technology*, 30(11); 1525-1531
- Basan, S. 2001. Polimer Kimyası. Cumhuriyet Üniversitesi Yayınları:88, 367 s., Sivas.
- Bolat, S. ve Kalenderli, Ö. 2003. Levenberg-Marquardt Algoritması Kullanılan Yapay Sinir Ağı ile Elektrot Biçim Optimizasyonu. *International XII. Turkish Symposium on Artificial Intelligence and Neural Networks – TAINN*.
- Chen, S. A. and Huang, N. W. 1980. Minimum end time policies for batchwise radical chain polymerization III, *Chem. Eng. Sci.*, 36; 1295-1305.
- Curteanu, S. and Petrilă, C. 2006. Neural Network-Based Modeling for Semi-Batch and Nonisothermal Free Radical Polymerization. *International Journal of Quantum Chemistry*, 106; 1445-1456.
- Ekpo, E.E. and Mujtaba I.M. 2008. Evaluation of neural networks-based controllers in batch polymerisation of methyl methacrylate. *Neurocomputing*, 71; 1401-1412
- Elmas, Ç. 2003. Yapay Sinir Ağları (Kuram, Mimari, Eğitim, Uygulama). Seçkin Yayıncılık, Ankara.
- Etike, E., Özkan, G., Hapoğlu, H., Albaz, M. 2008. Otomatik Kontrol Ulusal Toplantısı Bildiriler Kitabı cilt 2, 13-15 Kasım 2008, İTÜ, İstanbul.
- Fernandes, F.A.N. and Lona, L.M.F. 2005. Neural Network Applications in Polymerization Processes. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 22(03); 401-418.
- HARVARD GRADUATE SCHOOL OF EDUCATION, 2004. Web sitesi. <http://gseacademic.harvard.edu/~elsheish/hidden.htm>. Erişim Tarihi: 7 Ocak 2009.
- Hasan, A. R. 1990. Soğutma suyu ceketli kesikli bir polimer reaktörünün dinamik özellikleri. G.Ü.F.B.E. Yüksek Lisans tezi, Ankara.
- Hebb, D.O. 1949. *The Organization of Behavior*. Wiley, New York.

- Hussain, M.A. 1999. Review of the applications of neural networks in chemical process control — simulation and online implementation. *Artificial Intelligence in Engineering*, 13(1); 55-68.
- Martins, F.G. and Coelho M.A.N. 2000. Application of feedforward artificial neural networks to improve process control of PID-based control algorithms. *Computers & Chemical Engineering*, 24(2-7); 853-858.
- McCulloch, W.S. and Pitts, W. 1943. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity, *Bulletin of Mathematical Biophysics*, 5; 115–133.
- Minsky, M. and Papert, S. 1969. *Perceptrons*. MIT Press, Cambridge.
- Mjalli, F.S. and Al-Asheh, S. 2005. Neural-Networks-Based Feedback Linearization versus Model Predictive Control of Continuous Alcoholic Fermentation Process. *Chemical Engineering & Technology*, 28(10); 1191-1200.
- Nagy, Z.K. 2007. Model based control of a yeast fermentation bioreactor using optimally designed artificial neural networks. *Chemical Engineering Journal*, 127(1-3); 95-109.
- Özkan, G. 1997. Polistiren Reaktörünün Optimum Sıcaklık Profiline Adaptif Genelleştirilmiş Prediktif Kontrolün Uygulanması. Ankara Üniv. Fen Bil. Enst. Doktora tezi, Ankara.
- Özkan, G., Hapoğlu, H., Alpbaz, M. 2006. Non-linear generalised predictive control of a jacketed well mixed tank as applied to a batch process—A polymerisation reaction, *Applied Thermal Engineering*, 26(7); 720-726.
- Öztemel, E. 2003. *Yapay Sinir Ağları*. Papatya Yayıncılık, sf 36. İstanbul.
- Rumelhart, D.E., Hinton, G.E. and Williams, R.J. 1986. Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, (323); 533-536.
- Tan, Y. and Cauwenberghe, A. V. 1996. Nonlinear One-step-ahead Control Using Neural Networks: Control Strategy and Stability Design. *Automatica*, 32(12); 1701-1706.
- Tekin, Ö. 2005. Polimer reaktöründe jenerik model kontrolün uygulanması. Ankara Üniv. Fen. Bil. Enst. Yüksek lisans tezi, Ankara.
- Tian, Y., Zhang, J., Morris, J. 2002. Optimal control of a batch emulsion copolymerisation reactor based on recurrent neural network models. *Chemical Engineering and Processing*, 41(6); 531-538.

- Widrow, B. and Hoff, M.E. 1960. Adaptive Switching Circuits, 1960 IRE WESCON Convention Record, New York: IRE pp. 96-104
- Yüceer M., Atasoy İ., Berber R. 2006. İzotermal olmayan sürekli karıştırılmalı bir tank reaktörde yapay sinir ağı ile derişim kontrolü, Gazi Üniversitesi Müh. Mim. Fak. Dergisi, 21(4); 721-727.

EKLER

EK-1 Monomer Dönüşümü İçin Hesaplama.....	76
EK-2 Deneyde Kullanılan Kontrol Programı (Visual Basic).....	77

EK-1 Monomer Dönüşümü İçin Hesaplama

Tepkime sonunda stirenin polistirene dönüşen yüzdesini hesaplamak üzere tepkime kabından pipet ile 5 ml çözelti alınarak 50 ml metanol içinde çöktürülmüştür. Goach krozesinde süzülüp vakumlu etüvde kurutulduktan sonra tartılmış ve polimer kütlesi belirlenmiştir.

% dönüşüm değerleri aşağıdaki denkleme göre hesaplanmıştır.

$$\%Dönüşön = \frac{m_p V_t}{5V_s \rho_s} \times 100$$

Burada toplam karışım (stiren+toluen) hacmi $V_t=1100$ ml, stiren hacmi $V_s=770$ ml ve stiren yoğunluğu $\rho_s=0.87$ g/cm³ olarak alınmıştır. m_p , alınan her numune için boş ve dolu kroze kütleleri farkı alınarak bulunmuştur.

EK-2 Deneyde Kullanılan Kontrol Programı (Visual Basic)

```
w11=-0.020209
w12=0.0081864
w13=-0.001663
w14=-0.009824
w15=0.0039121

w21=3.5582
w22=-40.5218
w23=35.4169
w24=9.2695
w25=0.50177

w1=-71.0043
w2=-0.50827

b1=1.3569
b2=-88.402

bb=95.5491

A= w11*yt1 + w12*yt2 + w13*yt3 + w14*ut1 + w15*ut2 + b1
B= w21*yt1 + w22*yt2 + w23*yt3 + w24*ut1 + w25*ut2 + b2

yt1=T1

DA=(1+EXP(-2*A))
DB=(1+EXP(-2*B))

yy1=w1*((2/DA)-1)+w2*((2/DB)-1)+bb

DS1=(4*EXP(-2*A))/(DA*DA)
DS2=(4*EXP(-2*B))/(DB*DB)

DET1 = -(w1*DS1*w13) - (w2*DS2*w23)

ED=34200.
AD=2.6E+16
E1=23320.
A1=4.784E+10
I0=0.0185
P2=9503.
C=-P2*6.092
CI=I0
TEA=ED/(SQR(I0)*A1*C*(E1-ED))
THG=-E1/(1.987*LOG(TEA))

KD=AD*EXP(-ED/(1.987*THG))
DI=-KD*CI
CI=CI+DI*TT
TEA=ED/(CI^.5*A1*C*(E1-ED))
THG=-E1/(1.987*LOG(TEA))

TT=TT+0.9

SetT=THG-273.15
```

```

et=SetT-yy1
kat=(lambda/(1+alpha*lambda))

kat=5.0
ut = ut1 - kat * et * DET1

if ut>10.0 then
ut=10.0
end if
if ut<0 then
ut=0
end if

q=ut
ut1=ut
ut2=ut1
yt2=yt1
yt3=yt2

outputf 5, yy1
outputf 6, SetT
outputf 7, q

```

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Erkin ETİKE

Doğum Yeri : Ankara

Doğum Tarihi : 18.09.1981

Medeni Hali : Evli

Yabancı Dili : İngilizce

Eğitim Durumu

Lise : Ankara Tevfik Fikret Lisesi (1999)

Lisans : ODTÜ Kimya Mühendisliği Bölümü (2005)

Yüksek Lisans: Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya
Mühendisliği Anabilim Dalı (2009)