ZESZYTY NAUKOWE POLITECHNIKI ŚLĄSKIEJ 1984

Seria: AUTOMATYKA z. 73 Nr kol. 798

Stanisław ŚWITALSKI

METODY WYRÓWNYWANIA DANYCH POMIAROWYCH PRZY NIEPEŁNEJ INFORMACJI POMIAROWEJ

Streszczenie. Przedstawiono trzy metody wyrównywania danych pomiarowych dla przypadków, gdy na skutek braku metod pomiarowych lub awarii przyrządów informacja pomiarowa jest niepełna. Każda z metod posiada swoje ograniczenia, które powodują, że przy zmieniającej się liczbie wielkości niemierzonych powstaje konieczność budowania dodatkowego algorytmu. Analiza tych ograniczeń ma na celu wytypowanie metody, dla której zmiany liczby wielkości niemierzonych mogą być uwzględnione w najprostszy sposób.

1. PROBLEM WYRÓWNYWANIA DANYCH PRZY NIEPEŁNEJ INFORMACJI POMIAROWEJ

Dla każdej instalacji technologicznej sformułować można pewną liczbę równań w oparciu o podstawowe prawa fizyczne. Mogą to być równania bilansu masy lub energii i równania wiążące ze sobą różne wielkości fizyczne (np. związek między gęstością roztworu i stężeniami poszczególnych składników). Równania te mają w ogólnym przypadku charakter nieliniowy i mogą być zapisane w sposób następujący:

$$\bar{f}(\bar{y}) = \bar{b}, \tag{1}$$

gdzie:

$\bar{y}$ - wektor wielkości zmiennych posiadający "m" składowych,

$\bar{f}$ - wektor posiadający "p" składowych,

$\bar{b}$ - wektor stały posiadający "p" składowych.

W rzeczywistych przypadkach $p < m$.

Zakładać będziemy dalej, że wszystkie funkcje $f_i(\bar{y})$ są klasy C^1. Jeżeli dokonamy pomiaru składowych wektora $\bar{y}$, to otrzymamy wektor $\bar{y}_m$, który, w ogólnym przypadku, nie będzie spełniał równania (1). Celem obliczeń wyrównawczych jest wyznaczenie takiego wektory $\bar{y}^*$, który spełnia równanie (1) i jednocześnie warunek:

$$1 = \left[\bar{y}_m - \bar{y}^*\right]^T \cdot P \cdot \left[\bar{y}_m - \bar{y}^*\right] = \text{minimum} \tag{2}$$

P jest to macierz wagowa o wymiarach $[m \times m]$. Najczęściej przyjmuje się, że błędy pomiaru poszczególnych wielkości są statystycznie niezależne i mają rozkład normalny o wartości średniej równej zero i dającej się określić wariancji. Macierz P jest wtedy macierzą diagonalną, a elementy diagonalne są odwrotnościami wariancji błędów pomiarowych.

Warunki konieczne by funkcja l osiągała ekstremum w punkcie $\bar{y}^*$, przy istnieniu więzów (1), są powszechnie znane jako tzw. warunki Lagrange'a.

Jeżeli wszystkie składowe wektora $\bar{y}$ są mierzone, to mówimy, że dysponujemy pełną informacją pomiarową. Załóżmy teraz, że pewne składowe wektora $\bar{y}$ są niemierzalne, przy czym liczba tych składowych może być różna w różnych seriach pomiarowych. Możemy wtedy rozbić wektor $\bar{y}$ na dwa wektory: $\bar{x}$ - wektor wielkości mierzalnych i $\bar{u}$ - wektor wielkości niemierzalnych.

$$\bar{y} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{u} \end{bmatrix} \tag{3}$$

Wektor $\bar{x}$ posiada (m-n) składowych, a wektor $\bar{u}$-n składowych, przy czym "n" może ulegać zmianie. Problem wyrównywania danych sformułujemy w tym przypadku w sposób następujący: poszukujemy takiego jednoznacznego rozwiązania w postaci wektorów $\bar{x}^*$ i $\bar{u}^*$, które spełniają równanie (1) i jednocześnie minimalizują funkcję:

$$l_x = [\bar{x}_m - \bar{x}^*]^T P_x [\bar{x}_m - \bar{x}^*] \tag{4}$$

P_x jest to diagonalna macierz wagowa o wymiarach $[(m-n)\times(m-n)]$. Diagonalnymi elementami tej macierzy są odwrotności wariancji błędów pomiarowych składowych wektora $\bar{x}$. $\bar{x}_m$ jest to wektor uzyskany z pomiarów.

Poniżej przedstawiono metody rozwiązania tak postawionego problemu.

2. METODA ELIMINACJI ZMIENNYCH NIEMIERZONYCH

2.1. Przypadek liniowy

Jeśli układ równań (1) jest liniowy, to można go przedstawić w formie macierzowej:

$$A\bar{y} = \bar{b} \tag{5}$$

Macierz A ma wymiary $[p \times m]$ i z założenia jest rzędu "p" $(p < m)$. Warunki Lagrange'a są w tym przypadku warunkami koniecznymi i wystarczającymi istnienia minimum funkcji l. Jeśli dokonamy rozbicia wektora $\bar{y}$ na wektory $\bar{x}$ i $\bar{u}$ wg relacji (3), to równanie (5) przyjmie postać:

$$A_1\bar{x} + A_2\bar{u} = \bar{b} \tag{6}$$

Macierz A_1 ma wymiary $[p\times(m-n)]$ i jest utworzona z pierwszych (m-n) kolumn macierzy A. Pozostałe n kolumn tworzy macierz A_2, która ma wymiary $[p\times n]$.

Aby można było wyeliminować wektor $\bar{u}$ z równania (6), a następnie po wyznaczeniu wektora $\bar{x}^*$ w sposób jednoznaczny określić składowe wektora $\bar{u}^*$, musi być spełniony warunek:

$$\varrho(A_2) = n, \tag{7}$$

tzn. rząd macierzy A_2 musi być równy liczbie jej kolumn. Stąd wynika, że maksymalna liczba wielkości niemierzalnych nie może być większa od liczby równań w modelu (5), a więc $n \leqslant p$. Jeśli warunek (7) jest spełniony i jednocześnie $n < p$, to należy utworzyć macierz A_4 o wymiarach $[n\times n]$ z liniowo niezależnych wierszy macierzy A_2 oraz macierz A_3 z wierszy macierzy A_1 o takich samych numerach jak te, które weszły w skład macierzy A_4. Otrzymamy w ten sposób równania pomocnicze:

$$A_3\bar{x} + A_4\bar{u} = \bar{b}_1, \tag{8}$$

gdzie $\bar{b}_1$ wektor o n składowych.

Ponieważ A_4 jest nieosobliwą macierzą kwadratową, to otrzymamy:

$$\bar{u} = A_4^{-1}\bar{b}_1 - A_4^{-1}A_3\bar{x} \tag{9}$$

Z pozostałych wierszy macierzy A_1 i A_2 tworzymy macierze A_5 i A_6 i otrzymujemy równanie:

$$A_5\bar{x} + A_6\bar{u} = \bar{b}_2 \tag{10}$$

Macierz A_5 ma wymiary $[(p-n)\times(m-n)]$, a macierz A_6 - $[(p-n)\times n]$.

Po wstawieniu (9) do (10) otrzymamy:

$$A_o\bar{x} = \bar{b}_o, \tag{11}$$

gdzie:

$$A_o = A_5 - A_6A_4^{-1}A_3 \tag{12}$$

$$\bar{b}_o = \bar{b}_2 - A_6A_4^{-1}\bar{b}_1 \tag{13}$$

Wektor $\bar{x}^*$ spełniający równanie (11) i minimalizujący funkcję l_x, może być wyznaczony ze wzoru [1]:

$$\bar{x}^* = \bar{x}_m - P_x^{-1}A_o\left[A_oP_x^{-1}A_o^T\right]^{-1}\left[A_o\bar{x}_m - \bar{b}_o\right] \tag{14}$$

Wektor $\bar{u}^*$ wyliczamy ze wzoru (9) wstawiając $\bar{x} = \bar{x}^*$. Wzór (14) może być wykorzystany do obliczenia $\bar{x}^*$, jeśli jest spełniony warunek:

$$\varrho(A_oP_x^{-1}A_o^T) = p-n \tag{15}$$

Jeśli liczba równań w modelu (5) jest mniejsza od liczby zmiennych niemierzonych, to jest możliwe uzyskanie jednoznacznego rozwiązania na $\bar{x}^*$, natomiast nie istnieje jednoznaczne rozwiązanie na $\bar{u}^*$.

2.2. Przypadek nieliniowy

Jeśli układ równań (1) jest nieliniowy, to możemy rozwinąć poszczególne funkcje $f_i(\bar{y})$ w szereg Taylora w otoczeniu punktu $\bar{y}_o$. Odrzucając wyrazy wyższych rzędów otrzymamy równania dla przyrostów w formie macierzowej:

$$A^*\Delta\bar{y} = \bar{b}^* \tag{16}$$

$$A^* = \left[a_{ij}^*\right]; \qquad i = 1,2,3,\dots,p; \qquad j = 1,2,\dots,m; \tag{17}$$

$$a_{ij}^* = \left(\frac{\partial f_i}{\partial y_j}\right)_{\bar{y}=\bar{y}_o}; \qquad \bar{b}^* = \bar{b} - \bar{f}(\bar{y}_o); \tag{18}$$

$$\Delta\bar{y} = \bar{y} - \bar{y}_o; \tag{19}$$

Wybór pierwszego przybliżenia $\bar{y}_o$ w przypadku pełnej informacji pomiarowej jest oczywisty. Przyjmujemy mianowicie $\bar{y}_o = \bar{y}_m$. Natomiast przy niepełnej informacji pomiarowej poważne trudności wiążą się z wyborem $\bar{u}_o$. Na skutek złego wyboru $\bar{u}_o$ obliczenia mogą być zbieżne do niewłaściwego rozwiązania (np. do lokalnego maksimum) lub może wystąpić brak zbieżności. Dlatego istnieje konieczność tworzenia dodatkowego algorytmu do wyznaczenia pierwszej wartości $\bar{u}_o$ po przyjęciu $\bar{x}_o = \bar{x}_m$. Jest to zwykle algorytm rozwiązywania układu n równań nieliniowych. W przypadku numerycznego rozwiązywania tego układu równań najbardziej wskazana do wykorzystania jest metoda Newtona, ze względu na to, że tworzone podczas jej stosowania macierze są identyczne z tymi, które występują przy eliminacji przyrostów zmiennych niemierzonych z układu równań (16). Obliczenia wyrównawcze przebiegają jak dla przypadku liniowego, z tym że obliczone są przyrosty zmiennych. Błąd wywołany linearyzacją można dowolnie zmniejszyć przez iteracyjny dobór punktu rozwinięcia.

3. METODA WYKORZYSTUJĄCA POJĘCIE UOGÓLNIONEJ INWERSJI MACIERZY

3.1. Przypadek liniowy

W pracach [3,4,5] przedstawiono wykorzystanie pojęcia uogólnionej inwersji macierzy do estymacji parametrów modeli matematycznych. Obecnie przedstawimy wykorzystanie szczególnego przypadku uogólnionej inwersji macierzy, tzw. inwersji Moore'a-Penrose'a (w skrócie M-P inwersji) do wyrównywania danych pomiarowych. Stosując M-P inwersję [2], przekształcić można równanie (5) do postaci:

$$\bar{y} = A^{\dagger}\bar{b} + C\bar{z}, \tag{20}$$

gdzie: $A^{\dagger}$ - M-P inwersja macierzy A, mająca wymiary $[m \times p]$.

Ponieważ założyliśmy, że rząd macierzy A wynosi p, macierz $A^{\dagger}$ może być wyliczona ze wzoru [2]:

$$A^{\dagger} = A^{T}(AA^{T})^{-1} \tag{21}$$

Macierz C ma wymiary $[m \times (m-p)]$ i powstaje z (m-p) niezależnych kolumn macierzy H.

$$H = E - A^{\dagger}A \tag{22}$$

E - macierz jednostkowa o wymiarach $[m \times m]$,

$\bar{z}$ - dowolny wektor o (m-p) składowych.

Pojawia się tu konieczność wybierania (m-p) niezależnych liniowo kolumn z macierzy o wymiarach $[m \times m]$. W przypadku dużego m i małej liczby równań p jest to operacja dość kłopotliwa. Trzeba jednak zauważyć, że dla danego zestawu równań wykonywana jest ona tylko raz i nie musi być powtarzana, jeśli zmieni się liczba zmiennych niemierzonych.

Zagadnienie wyrónywania danych sprowadzone zostało do poszukiwania jednoznacznego rozwiązania w postaci wektorów $\bar{y}^*$ i $\bar{z}^*$, które spełniają równanie (20) i minimalizują funkcję l_z.

$$l_z = [\bar{y}_m - \bar{y}(\bar{z})]^{T} P_z [\bar{y}_m - \bar{y}(\bar{z})] \tag{23}$$

P_z jest diagonalną macierzą wagową. Elementy diagonalne tej macierzy,odpowiadające zmiennym mierzonym, są odwrotnościami wariancji błędów pomiarowych, natomiast elementy odpowiadające zmiennym niemierzonym są równe zero. Wektory $\bar{z}^*$ i $\bar{y}^*$ obliczane są ze wzorów:

$$\bar{z}^* = \left[C^T P_z C\right]^{-1} C^T P_z (\bar{y}_m - A^{\dagger}\bar{b}) \tag{24}$$

$$\bar{y}^* = A^{\dagger}\bar{b} + C\bar{z}^* \tag{25}$$

Warunkiem istnienia jednoznacznego rozwiązania jest:

$$\varrho(C^T P_z C) = m-p \tag{26}$$

Stąd wynika również wniosek, że maksymalna liczba zmiennych niemierzonych, przy której istnieje jeszcze jednoznaczne rozwiązanie wynosi p.

3.2. Przypadek nieliniowy

Postępując w sposób podobny jak w punkcie 2.2 otrzymać można algorytm iteracyjny, wykorzystujący zależności (24) i (25) określone dla przypadku liniowego. Elementy wszystkich macierzy będą w każdej iteracji ulegać zmianie. Wydłuża to w znacznym stopniu czas obliczeń.

4. METODA POLEGAJĄCA NA TRAKTOWANIU WIELKOŚCI NIEMIERZALNYCH JAKO PARAMETRY

4.1. Przypadek liniowy

Przekształcając wzór (6) otrzymamy:

$$A_1\bar{x} = \bar{b} - A_2\bar{u} \tag{27}$$

Ponieważ wektor $\bar{u}$ nie jest mierzony, nasuwa się możliwość potraktowania go jako wektora parametrów. Wektor $\bar{u}^*$, minimalizujący funkcję l_x i spełniający równanie (27), wyznaczymy z warunków Lagrange'a. Otrzymamy następujące zależności:

$$\bar{u}^* = -\left[A_2^T G^{-1} A_2\right]^{-1} A_2^T G^{-1}\left[A_1\bar{x}_m - \bar{b}\right] \tag{28}$$

$$G = A_1 P_x A_1^T \tag{29}$$

$$\bar{x}^* = \bar{x}_m - P_x^{-1} A_1 G^{-1}\left[A_1\bar{x}_m - \bar{b} - A_2\bar{u}^*\right] \tag{30}$$

Wzory (28) i (30) mogą być stosowane, gdy są spełnione warunki:

$$\varrho(G) = p; \qquad \varrho(A_2^T G^{-1} A_2) = n; \tag{31}$$

Z warunków tych wynika, że rząd macierzy A_1 musi być równy p, natomiast rząd macierzy A_2 musi być równy n. A zatem maksymalna liczba wielkości niemierzalnych wynosi p.

Nawet jeśli nie jest spełniony pierwszy z warunków (31), tzn. $\varrho(G) = r < p$, uzyskanie jednoznacznego rozwiązania jest możliwe. Można mianowicie sprowadzić zagadnienie do problemu estymacji parametrów z uwzględnieniem więzów równościowych łączących parametry. Problem tego typu rozpatrywany był w pracy [7]. Przedstawienie problemu wyrónywania danych w taki sposób, aby można było stosować jedną z metod proponowanych w pracy [7], jest proste tylko w przypadku, gdy wiersze liniowo zależne macierzy A_1 są wierszami zerowymi. W innym przypadku konieczne jest tworzenie dodatkowego algorytmu przygotowującego zadanie do rozwiązania jedną z następujących metod [7]:

- metodą rugowania $p-r$ parametrów,
- metodą modyfikacji funkcji l_x przez wprowadzenie do niej tzw. funkcji kary,
- metodą dwuetapową, w której najpierw wyliczane są optymalne wartości parametrów bez uwzględnienia łączących je więzów, a potem wprowadzane są poprawki.

Wszystkie te metody wymagają tworzenia dość złożonych algorytmów.

4.2. Przypadek nieliniowy

W przypadku problemu nieliniowego postępować będziemy tak jak w punkcie 2.2 sprowadzając zagadnienie do problemu liniowego dla przyrostów.

5. WNIOSKI KOŃCOWE

W tabeli 1 zebrano ważniejsze ograniczenia i operacje, które wpływają na uniwersalność danej metody wyrównywania danych i czas trwania obliczeń. Z przedstawionej analizy wynika, że metodą najbardziej uniwersalną, a więc zapewniającą również prosty sposób uwzględniania zmienności liczby wielkości niemierzonych, jest metoda wykorzystująca pojęcie M-P inwersji. Metoda ta wymaga jednak dużo miejsca w pamięci komputera, szczególnie w przypadku gdy $p \ll m$. Istnieją jednak takie szczególne przypadki problemu wyrównywania danych, dla których korzystniejsze jest stosowanie metod przedstawionych w punktach 2 i 4.

Tabela 1

Ograniczenia, operacje dodatkowe \ Metoda	Eliminacja zmiennych niemierzonych	Metoda M-P inwersji	Metoda parametrów
Maksymalna liczba wielkości niemierzonych	$n \leq p$	$n \leq p$	$n \leq p$
Ograniczenia na rzędy macierzy	$\varrho(A_2) = n$ $\varrho(A_0) = p-n$	$\varrho(C^T P_z C) = m-p$	$\varrho(A_1) = p$ $\varrho(A_2) = n$
Wybieranie wierszy lub kolumn liniowo niezależnych	n wierszy z macierzy A_2	$(m-o)$ kolumn z macierzy H	r wierszy z macierzy A_1 n wierszy z macierzy A_2
Odwracanie macierzy	A_4 o wymiarach $[n \times n]$ $(A_0 P_x^{-1} A_0^T)$ o wymiarach $[(p-n) \times (p-n)]$	$(C^T P_z C)$ o wymiarach: $[(m-p) \times (m-p)]$ $(A\ A^T)$ o wymiarach $[p \times p]$	(G) o wymiarach $[p \times p]$ $(A_2^T G^{-1} A_2)$ o wymiarach $[n \times n]$
Operacje związane ze zmiennością liczby wielkości niemierzonych	Wybieranie n równań do eliminacji n zmiennych	Wstawienie zer w macierzy wagowej	1. Jeśli $\varrho(A_1) < p_1$ algorytm sprowadzający zagadnienie do postaci klasycznej problemu estymacji parametrów z uwzględnieniem więzów. 2. Algorytm estymacji parametrów z uwzględnieniem więzów

LITERATURA

[1] Brandt S.: Metody statystyczne i obliczeniowe analizy danych. PWN, Warszawa 1974.

[2] Warmus M.: Uogólnione odwrotności macierzy. PWN, Warszawa 1972.

[3] Świtalski St.: Estymacja parametrów modelu matematycznego reaktora chemicznego na przykładzie reaktora do konwersji metanu. Praca doktorska, Gliwice 1976.

[4] Świtalski St.: Ogólny algorytm estymacji parametrów statycznych modeli matematycznych, oparty na wykorzystaniu pojęcia pseudoinwersji macierzy. Seminarium UiUA, Gliwice 1977.

[5] Świtalski St.: Application of generalized invers of matrix for estimation of mathematical model parameters of chemical reactor. Symp. "Computers in Chemical Engineering". Smokowiec 1977.

[6] Noble B.: A method for computing the generalized invers of matrix. SIAM J. NUM. Anal. Vol. 3, 1966.

[7] Skowronek M.: Identyfikacja z uwzględnieniem więzów łączących parametry modelu. Praca doktorska, Gliwice 1978.

Recenzent: Doc. dr inż. Maria Jastrzębska

Wpłynęło do Redakcji: luty 1983 r.

МЕТОДЫ ВЫРАВНИВАНИЯ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ ДАННЫХ ДЛЯ НЕПОЛНОЙ ИЗМЕРИТЕЛЬНОЙ ИНФОРМАЦИИ

Р е з ю м е

В работе представлены 3 метода вырывнивания измерительных данных для неполной измерительной информации. Выравнивание происходит на базе уравнений описывающих технологическую установку. Некоторые величины выступающие в этих уравнениях, неизмеримые из-за отсуствия методов измерений или в результате аварии измерительных приборов. Число неизмеримых величин изменяется и это вызывает необходимость образования добавочных алгоритмов для каждого метода выравнивания данных. Приведенный в работе анализ делает возможным выбор метода, в котором учёт изменений числа неизмеримых величин может быть сделан самым простым образом.

THE METHODS OF MEASURING DATA SMOOTHING
FOR INCOMPLETE MEASURING INFORMATION

S u m m a r y

Three methods of measuring data smoothing for incomplete measuring information are presented. The smoothing process of data is based on the equations describing the technological installation. Some quantities occuring in these equations are unmeasurable because of the lack of measuring methods or as a result of measuring devices damage. The number of unmeasurable quantities varies and it is neccessary to form an additional algorithm for each of presented methods of data smoothing. Presented analysis enables choosing of the method for which changes of the number of unmeasurable quantities can be taken into account in the simplest way.