tanulmányok 108/1980

MTA Számitástechnikai és Automatizálási Kutató Intézet Budapest

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
SZÁMITÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATO INTÉZETE

MÉRLEGEGYENLETEK ÉS MÉRÉSI HIBÁK

Irta:

ALMÁSY GEDEON

DOKTORI ÉRTEKEZÉS

Tanulmányok 108/1980.

A kiadásért felelős:
DR VÁMOS TIBOR

ISBN 963 311 105 6
ISSN 0324 - 2951

Készült a SZÁMOK KSH nyomdájában
143/7220

TARTALOMJEGYZÉK

Oldal

Oldal

Oldal

Oldal

BEVEZETÉS

Üzemben, vagy laboratóriumban mérések utján szerzünk információt az ott folyó technológiai folyamatról, ill. kisérletről. Méréseink azonban mindig több-kevesebb hibával terheltek, igy a keresett értéket teljes pontossággal sohasem ismerhetjük meg. Ezért, akár müszaki, akár irányitási, gazdasági, elszámolási vagy tudományos célra akarjuk a mért adatokat felhasználni, meg kell győződnünk arról, hogy elfogadhatók-e, hibájuk nem haladja-e meg a felhasználás szempontjából még megengedhető határt. Téves adatokra alapozva ui. sulyos következményekkel járó müszaki vagy gazdasági döntések születhetnek.

Különösen fontos, hogy valamiféle számszerü információval rendelkezzünk a mérési adatok megbizhatóságáról, ha számitógépes adatgyüjtésről és közvetlenül ahhoz kapcsolódó adatfeldolgozásról, vagy irányitásról van szó. Ilyenkor ui. a mért adatok emberi beavatkozás, tehát mindennemü emberi kritika nélkül kerülnek feldolgozásra. Hagyományos felhasználás során az adatokat felhasználó szakember /táblakezelő, üzemvezető, diszpécser, kisérletet értékelő kutató, stb./ az adatokat több-kevesebb gyakorlat után már tudat alatt is ellenőrzi: a szokatlan adatrendszerekre felfigyel és alaposabban megvizsgálja, hogy a tapasztalt feltünő jelenség nem mérési hiba következménye-e. Ez az a tevékenység, amit automatikus adatgyüjtés esetén szintén automatikusan, programozottan, magával a feldolgozást végző számitógéppel kell elvégeztetni.

A felhasználók hibaellenőrzéssel kapcsolatos természetes igénye, hogy a rendszerre vonatkozó információk ne legyenek ellentmondásban a mérlegegyenletekkel. Az ellentmondásmentesség a feltétele annak, hogy ne legyenek az üzemben ismeretlen veszteségek és hogy a döntések és elszámolások ne függjenek attól, hogy a különböző információforrások közül éppen melyiknek adnak hitelt.

Ez az értekezés a mérlegegyenletek mérési hibákból eredő ellentmondásainak vizsgálatát és feloldását tüzi ki céljául, mind a rendszerek állapotával, mind matematikai modelljének együtthatóbecslésével kapcsolatban.

Az értekezésben a mérlegegyenletek fogalmát kizárólag megmaradó mennyiségekre és forrásmentes rendszerekre értelmezzük,mint azt a 2.fejezetben részletesebben kifejtjük. Itt jegyzem meg, hogy a 2.fejezet fogalmi bevezetés jellegü és - beleértve a hozzátartozó függelékeket is - nem lép fel tudományos ujdonság igényével. Közlésének elsődleges célja az értekezésben később általánosan használt összefüggések fizikai tartalmának meghatározása, összekötve ezt az alapvető megmaradási törvények és a mérlegegyenletek kapcsolatának formailag ujszerü bemutatásával.

Kizárólag müveleti egységek globális mérlegeivel és összetett rendszerek ilyenekből összetett mérlegeivel foglalkozom, és nem tekintem az értekezés tárgyának a térben folytonosan változó állapotu rendszerek differenciális mérlegegyenleteit, az un. transzportegyenleteket.

Az értekezés csak véges számu mérlegegyenlet ellenőrzésével és kiegyenlitéssel foglalkozik. Igy nem tárgyalja a folytonos összetételü elegyek mérlegeit, amiről társszerzőkkel szintén jelent meg közleményünk [3,39,40]. Hasonlóképpen nem szerepel annak elemzése, hogy miként lehet az itt véges számu csomópontra megfogalmazott összefüggéseket a tér kontinuum számosságu elemére értelmezni, vagyis hogy mi az itt tárgyalt mérlegegyenletek és a transzportegyenletek - mint mérlegegyenletek - közös alapja. Az első ezirányu lépésről Virág Tibor barátommal közös közleményünkben [47] számoltunk be, Virág kandidátusi értekezéséből [46] kiindulva.

Nem tartalmazza az értekezés a mérleghiba kiegyenlités elvének dinamikus rendszerek állapotbecslésére való kiterjesztését sem. Az erre irányuló munkát Gertler János barátommal együtt kezdtük el [13,14], aki ezt a témát a jelen értekezéssel párhuzamosan tovább müvelte és arról szintén doktori értekezésben számolt be [15].

Ugyancsak kizártam a tárgyalásból az összetett rendszerek mérleghelyes statikus matematikai modellezésének módszertanát, amit az irodalom gyakran szintén mérlegszámitásnak nevez /lásd pl. Henley-Rosen [18], Nagijev [30] és Kafarov [21] munkáit/.

A matematikai tárgyalás áttekinthetőségének igénye két egyszerüsitő feltevést tett szükségessé: a mérési hibák normális eloszlását és a mérlegegyenleteket képviselő feltételrendszer linearitását. Ugy vélem, hogy az elméleti eredmények alkalmazási körét ezek a feltevések csak kis mértékben korlátozzák. A rendkivüli hibáktól eltekintve, a szokásos véletlen mérési hibák normális eloszlásának feltételezése ugyanis legtöbbször elfogadható. A hibák feltételezett eloszlásának ellenőrzését elősegiti az is, hogy bizonyos tipusu rendkivüli hibák jelzésére az értekezés elméletileg is jól megalapozott algoritmust ajánl. A nemlineáris feltételi egyenletek kérdésével az értekezés csak érintőlegesen foglalkozik. A tartalmi, formai és módszertani egység kivánalmából következően az e tárgyban szerzőtársaimmal kidolgozott munkánkat az értekezés nem tartalmazza [1].

Nem foglalkozik az értekezés a levezetett összefüggések kiszámitásának numerikus technikájával. Ugy itéltem, hogy ez a számitógép programozás szakembereire tartozik és mint ilyen, nem a dolgozat tárgya.

Az értekezés jelentős része matematikai tárgyalás jellegü. Mégis, hangsulyozni kivánom, hogy egyetlen része sem lép fel matematikai ujdonság igényével. A tárgyalás célja az, hogy megmutassa a mérések ellenőrzésének és a mérleghibák kiegyenlitésének gyakorlati feladatait és hogy megkeresse és felhasználja azokat az egzakt matematikai eszközöket, amelyek segitségével az adatokban lévő információk a lehető legjobban felhasználhatók, megtartva természetesen a matematikai korrektség igényét.

Az értekezés a fogalmi bevezetés után mátrix irásmódot alkalmaz. Enélkül az összefüggések tárgyalása gyakorlatilag nem volna lehetséges. Ebből kifolyólag alapismeretként feltételezi a lineáris algebra alapjainak, a mátrixkalkulus és a szimmetrikus mátrixok főtengelytranszformációjának ismeretét. Felhasználja ezeken kivül néhány skalármátrix függvény mátrix szerinti deriválásának kevésbé ismert technikáját és bizonyos mátrixegyenleteknek a Neudecker-féle technikával [32] való tárgyalását és megoldását. A megértéshez szükséges alapismereteket mindkettőre vonatkozóan a függelékben közlöm.

Feltételezi az értekezés ezeken kivül a sztochasztikus vektorváltozókkal és azok lineáris függvényeivel kapcsolatos elemi ismereteket. Az eziránt érdeklődők számára Rao könyve [33] ajánlható.

Az értekezésben szerepel néhány olyan téma, amelynél csupán a feladat megfogalmazása és értelmezése saját munkám, matematikai megoldása nem. Ilyen esetekben a matematikai tárgyalást leiró függelékeknél az adott függelék szerzőjének nevét zárójelben feltüntettem.

A függelék ezeken kivül tartalmazza néhány, az értekezés megértéséhez szükséges, kevésbé elterjedt fogalom és összefüggés rövid ismertetését. Ugyancsak a függelékben található néhány olyan hosszadalmasabb matematikai levezetés, amely önmagában nem tekintendő tudományos eredménynek, de közlése a dolgozat alkalmazhatósága vagy érthetősége szempontjából szükséges.

Alkalmazási vagy bemutató példákat az értekezés szervesen nem tartalmaz, de ilyenek a témakörrel kapcsolatos közleményeinkben találhatók. Ezekre a megfelelő fejezetekben utalok. A példákat tartalmazó részletek másolatát az értekezéssel egybekötve mellékelem.

Köszönetnyilvánitás

A dolgozatban összefoglalt munka az MTA Számitástechnikai és Automatizálási Kutató Intézetében készült. Az intézet igazgatósága az értekezés kidolgozását nemcsak lehetővé tette és támogatta, hanem hosszu időn át kitartóan biztatott megirására. Ezért köszönettel tartozom Vámos Tibor akadémikusnak, Hamar Károly és Gertler János kandidátusoknak, továbbá korábbi osztályvezetőmnek, Pallai Ivánnak, a kémiai tudományok doktorának.

Legnagyobb köszönettel Sztanó Tamás barátomnak és régi, közvetlen munkatársamnak tartozom, aki nagy másirányu elfoglaltsága mellett is mindig kész volt alkotó munkaközi vitákra, eredményeim ellenőrzésére, vagy szükség esetén levezetések hiányzó részeinek kidolgozására. Hangos Katalin munkatársamnak elsősorban az értekezés szerkesztésében nyujtott segitségét köszönöm. Krámli András kandidátust a dolgozat egy fontos részének egzakt matematikai alátámasztásáért illeti köszönet. A tárgykörbe tartozó vagy az azt érintő közlemények társszerzőinek a gondolatébresztő közös munkáért tartozom hálával.

A dolgozat egészének vagy egyes részeinek átolvasásáért és az azzal kapcsolatos értékes megjegyzéseikért Almásy Andor doktornak, Benedek Pál akadémikusnak, Gerencsér László, Gertler János, Hamar Károly kandidátusoknak, Hangos Katalinnak, Jedlovszky Pál, Krámli András kandidátusoknak, Pallai Iván doktornak, Sztanó Tamásnak, Vámos Tibor akadémikusnak és Veress Gábor kandidátusnak tartozom köszönettel.

Ezuton köszönöm Karvázy Gyulánénak a kézirat gépelésének, Hollósi Erzsébetnek és Schmidt Jánosnénak az értekezés végső formába öntésének gondos munkáját.

1 ELŐZMÉNYEK

1.1 A mérési hibák kiegyenlitése

A mérési hibákból adódó ellentmondások feloldására a legkisebb négyzetek /LKN/ elve már az értekezés és annak előzményeinek kidolgozása előtt ismeretes volt. Ez a hibakiegyenlitésnek is nevezett feladat először a geodéziai mérésekkel kapcsolatban vetődött fel a háromszögelési mérések eredményeinek értékelése során, a mért szögértékek és a háromszög szögeinek összegére vonatkozó tétel ellentmondásainak feloldására. Ennek a témának részletes feldolgozása pl. Grossmann könyvében található [16] a lineáris feltételi egyenletekkel korlátozott LKN együtthatóbecslés leirásával együtt. Az elv vegyipari alkalmazását először valószinüleg Kuehn és Davidson irta le 1961-ben [26]. Ők mutattak rá a hibakiegyenlités jelentőségére és arra, hogy a mérlegegyenletek révén az összetett rendszerekre vonatkozó mérések redundanciáját fel lehet használni a valódi érték becslési pontosságának javitására. A témát részletesen tárgyalta 1964-ben Swenker [37]. Ő ismertette először a hibakiegyenlités megoldását általánosan, áttekinthető mátrix irásmódban, részletesen kitérve számos részkérdésre, igy a méretlen mennyiségek számitására, a közelitési hibáknak a mérési hibák szórásával való sulyozására, a nemlineáris mérlegegyenletrendszerre vezető esetek ismertetésére stb. Ez a közlemény mutat rá a vegyipari mérési hibák kiegyenlitésével kapcsolatban először arra a tényre, hogy a LKN együtthatóbecslés lineáris feltételi egyenletrendszer esetében is azonos a max. likelihood /ML/ becsléssel, ha a mérési hibák eloszlása 0 várható értékü és normális, és ha a közelitési hibát a változók szórásával sulyozzuk. Néhány nemlineáris /bilineáris/ feladatra vezető esetet is tárgyal, és ezek megoldására közelitő algoritmust is javasol az összefüggés linearizálásával, az általa javasolt módszer pontossága azonban nem kielégitő. Ilyen tipusu mérlegegyenletek esetében alkalmazandó bizonyitottan konvergens, iterativ hibakiegyenlitési algoritmust az értekezés szerzője és társszerzői ismertettek 1969-ben [1]. Ez utóbbi munkánk abból a felismerésből indult ki, hogy az R. Hoffmann és R. Müller által javasolt direkt iteráció [19], vagyis a kiegyenlitőszámitás korrigált értékekkel történő ismétlése nem a helyes megoldáshoz konvergál és az eredmény függ az iteráció kezdő értékétől. Ezt az algoritmusunkat a Péti Nitrogénmüvek Ammónia II. gyáregységének mérleghiba kiegyenlitésénél alkalmaztuk. Ennek leirását az 1.melléklet tartalmazza.

A többkomponensü rendszerek mérlegegyenleteit más közlemények is tárgyalják. Václavek [41] mutatott rá arra, hogy ha a komponensáramokat tekintjük kiegyenlitendő mérlegváltozóknak annak ellenére, hogy az össz-tömegáramot és a koncentrációkat mérjük, akkor ezt a kiegyenlités során sulyozó faktorokban figyelembe kell venni. Nem szerepel azonban ebben a munkában az, hogy ebben az esetben a kiegyenlitett változók hibái korreláltak.

Az összáram és koncentrációk mérésével megfogalmazott nemlineáris mérlegek problémáját tárgyalja Václavek és szerzőtársai egy másik munkája is [44], de ez csupán a feladat Lagrange-multiplikátoros megoldásának elvét ismerteti. F. Kaufmann és szerzőtársai [23] az összáramok és koncentrációk szorzatából adódó bilineáris komponensmérlegek megfogalmazására jól áttekinthető mátrix formalizmust alkalmaznak, az ebből adódó nemlineáris egyenletek megoldására javasolt algoritmusuk azonban elméletileg megalapozatlan.

Murthy közleménye [29] kb. 9 évvel Swenker alapvető cikke [37] után jelent meg az egyik legismertebb folyóiratban, de ujat gyakorlatilag nem tartalmaz, bár sem elvi, sem metodikai összefoglalónak nem tekinthető. Ez a tény arra mutat, hogy a kezdeti lépések nemigen váltak közismertté. Magának Swenkernek is jelent meg még közleménye [38] 7 évvel első dolgozata után, csupán az ismert módszerek ujabb ismertetéseként. Igen érdekes viszont Kauschus /tudtommal publikálatlan/ megoldása [24], ami elvileg azonos a lineáris mérleghiba kiegyenlitéssel, de nem mátrix aritmetikát használ, hanem a kapcsolatok gráfjának megfelelően lépésenként vonja össze a részrendszereket, majd a maximálisan összevont rendszer triviális kiegyenlitése után az összevonással ellenkező irányu lépésekkel sorra nyeri a kiegyenlitett értékeket. A módszer alkalmazhatósága a kapcsolat gráfok bizonyos tipusaira korlátozódik és csak független mérési hibák feltételezésével használható, ebben az esetben viszont megtakaritható a mérőhelyek számának megfelelő rendü kvadratikus együtthatómátrix tárolása, ami különösen nagyméretü rendszereknél előnyös. Ezt az algoritmust alkalmazzák a PCK Schwedt /NDK/ teljes kombinátra kiterjedő mérlegének kiegyenlitésére.

A mérési hibák kiegyenlitésének egy, az előzőktől némiképpen eltérő elvét publikálta legujabban szerzőtársaival Mehra [36]. Ők az irányitáselméletben általánosan alkalmazott Kalman-szürő [22] elvet javasolták erre a célra. Ennek a megoldásnak nagy előnye lenne az, hogy a becsléshez és a mérések elfogadhatóságának ellenőrzéséhez nemcsak a pillanatnyi, hanem a régebbi információkat is felhasználja. Hibája azonban, hogy a változókról kizárólag sztochasztikus változást tételez fel, aminek következtében az algoritmus a müködési körülmények valóságos megváltozása esetén hibát jelez, még pontos mérések mellett is. Másik hiányossága, hogy a mérlegegyenleteket valójában csak a méretlen változók értékének becsléséhez használja, a mért értékek ellenőrzéséhez és korrekciójához nem. /Megjegyzendő, hogy a dolgozat az ilyen kiindulás elfogadása esetében is tartalmaz matematikailag nem korrekt állitásokat. Egyrészt két normális eloszlásu változó tapasztalati szórásnégyzetének hányadosa nem χ^2 eloszlásu, másrészt a kiugró észlelések elhagyása torzitja azt a statisztikát, amit a későbbi észlelések elbirálásához felhasznál./ Ezek miatt a javasolt eljárás vegyipari folyamatokra nem alkalmazható. Az a gondolat azonban figyelemreméltó és meggondolásra érdemes, hogy a Kalman-szürő alkalmazásával vagy anélkül, hogyan lehetne az adott pillanatot megelőző mérésekből eredő információt a korrekcióhoz és az elfogadhatóság ellenőrzéséhez felhasználni. A mérlegegyenletek korrekcióhoz való felhasználásának helyes megoldását jelenleg nem ismerjük. Az ellenőrzéshez való felhasználást egy korábbi közleményünkben már javasoltuk [4], a statisztika elfajulásának a problémája azonban ebben sincsen megoldva. A vizsgálat időpontját megelőző mérések figyelembevétele az aktuális állapot becsléséhez a rendszer dinamikus modelljének ismeretében lehetséges. Ezzel a problémakörrel első közös problémafelvető lépéseink után [13,14] Gertler János foglalkozik [15]. Ezért, és mivel a téma már inkább az irányitáselmélethez áll közelebb, ez a dolgozat az igy felvetett kérdést nem tárgyalja.

A mérési hibák kiegyenlitésének egy másik lehetősége a korrekciók lineáris programozással történő meghatározása [28]. Ez az algoritmus természetesen nem normális eloszlás esetében szolgáltat maximum likelihood becslést. Az idézett közlemény egyenletes eloszlásu hibákat emlit. Ez az állitás nyilvánvalóan téves, hiszen egyenletes eloszlás esetén a lehetséges állapotok egyenlő valószinüségüek. Belátható, hogy a lineáris programozás a hibák szimmetrikus exponenciális eloszlása /Laplace-eloszlás/ esetében ad maximum likelihood becslést [2o]. Hogy a gyakorlati hibakieegyenlitési feladatok során melyik algoritmus alkalmazása helyesebb, azt a mérési hibák statisztikus vizsgálatával kellene eldönteni. Olyan - üzemi körülmények között végzett - vizsgálatokról azonban, ahol a különböző méréshelyek hibái közötti kovarianciákat, a hibáknak mint sztochasztikus folyamatoknak autokovarianciáit és egyéb momentumait, a "módszeres hibákat" mint sztochasztikus folyamatokat stb. elemezték volna, nincsen tudomásunk. Egyetlen müszertipusról sikerült nullponthibákra vonatkozó adathalmazt szereznünk [34], ez azonban a kérdés eldöntésére messze nem elegendő. Ilyen jellegü mérések végzésére - a vizsgálat megvalósitásának nehézségei és munkaigényessége miatt - sajnos magunknak sem volt lehetőségünk.

1.2 A mérések elfogadhatósága

Az előbbiekben vázolt hibakiegyenlitési eljárásokkal szoros kapcsolatban van a mérések elfogadhatóságának, vagyis a durva hibák felismerésének kérdése. Általánosan ismert tény, hogy a megszokott LKN becslés használhatatlan eredményekre vezet, ha a mérési hibák között durva hibák is vannak. Ez matematikai-statisztikai értelemben abból következik, hogy a LKN becslés csak egyenlő szórásu, normális eloszlásu mérési hibák esetében ekvivalens a maximális valószinüségi állapottal, az un. durva hibák viszont ilyen eloszlás mellett csak olyan ritkán fordulhatnának elő, hogy az gyakorlatilag kizárható. A helyzet hasonló a mérési hibák mérlegegyenleteket kielégitő LKN módszerrel történő kiegyenlitése esetén is. A szokásos LKN közelités esetében az ellenőrzés a közelités után maradó hiba eloszlása alapján végezhető. Fontos tény viszont, hogy - bizonyos feltételek teljesülése mellett - a mérlegegyenletek felhasználásával egyetlen összetartozó méréshalmaz alapján is következtetni lehet arra, hogy tartalmaznak-e a mérések durva hibákat vagy sem.

A véletlen mérési hibák ellenőrzésének megszokott módja az adott mennyiség mérésének többszöri ismétlése /"párhuzamos" mérések, elemzések stb./, és az igy kapott értékekből számitható empirikus szórásnégyzet összehasonlitása a mérési módszerre vagy a müszerre megengedett hiba szórásnégyzetével. Ha a mérési hibák eloszlása normális és a módszer hibájának szórásnégyzetét eleve ismertnek lehet feltételezni, akkor a két mennyiség aránya χ^2 eloszlásu, ennek ismeretében pedig hipotézisvizsgálattal eldönthető, hogy a mérési hiba a tapasztalt szórás alapján elfogadhatónak minősithető-e vagy sem.

Ez a módszer üzemi mérések ellenőrzéséhez önmagában nem alkalmas, mert ezuton a gyakran előforduló erősen autokorrelált hibák /módszeres hiba, kalibrációs hiba vagy nullponthiba/ nem mutathatók ki. /Ha pl. egy termoelem áramköre szakadt és a müszer mindig 0-t jelez, a mérés empirikus szórásnégyzete 0-nak adódna!/. Ugyanakkor, üzemi körülmények között az ilyen vizsgálat azért sem lehetséges, mert számitani kell arra, hogy a vizsgált változó valóságos értéke a mérések ismétlése közben változik. Az ilyen hibák kimutatása etalonokkal való összehasonlitással volna lehetséges, de ez eléggé körülményes és semmiképpen nem képzelhető el állandó ellenőrzés céljaira. Az üzemi mérések ellenőrzésére olyan módszer volna célszerü, ami lehetőleg gyorsan, az üzem menetébe való beavatkozás, és külön e célra szolgáló hardware eszközök nélkül valósitható meg.

Számitógépes adatgyüjtés során általában az ellenőrzésnek azt a módját alkalmazzák, hogy az egyes méréshelyekhez alsó és felső korlátokat rendelnek, és a mérés eredményét akkor fogadják el, ha az a korlátok közé esik. Több változó egyidejü mérése esetén tehát az "összetett" mérést akkor minősitik elfogadhatónak, ha a mért változók terében az azt jelképező pont a megfelelő alsó-felső korlátok által meghatározott sokdimenziós parallelepidedonba esik.

Az elfogadhatóság ilyen módon történő ellenőrzése csak a legdurvább hibák, mint mérővezeték szakadás, vagy zárlat stb. jelzésére alkalmas, másra viszont ez az eljárás sem gyakorlati, sem elméleti szempontból nem kielégitő. Minthogy feltétlenül számitani kell ipari rendszerekben arra, hogy a mérendő változó valódi értéke a mérési hibához képest számottevő mértékben változik, a korlátokat ugy kell megválasztani, hogy az általuk meghatározott intervallum feltétlenül lefedje a lehetséges üzemállapotok teljes tartományát. Elvileg ez a rögzitett korlátokkal történő ellenőrzés a mért mennyiségek egyenletes eloszlása esetében indokolt: ami a korlátok közé esik, az számunkra egyenlően valószinü és elfogadható, ami azon kivül, annak a valószinüsége nulla, tehát elvetendő. Teljesen nyilvánvaló, hogy az ilyen eloszlás még a legnagyvonalubb közelitésként sem fogadható el, és ennek következménye az, hogy az ilyen módon történő ellenőrzés másodfaju hibáinak valószinüsége, tehát az, hogy hibás mérést is elfogad, igen nagy.

A másodfaju hiba valószinüségének csökkentésére lehet heurisztikus megoldásokat alkalmazni: a mérések ismétlését, a változás sebességének ellenőrzését és más változók mért értékeivel való összehasonlitását [17].

Az alsó-felső korlátokkal történőnél hatékonyabb ellenőrzéshez valamiféle mozgó korlátokat, elfogadhatósági sávot szeretnénk definiálni a változó valóságos értékek körül. Ez nyilván nem lehetséges, hiszen a valódi értékek ismeretlenek, de ha rendelkezésünkre állna a rendszer pontos matematikai modellje, vizsgálhatnánk, hogy a mérési eredmények milyen mértékben elégitik ki azt, illetve mondanak ellene. Ilyen pontos modellel sohasem rendelkezünk, de megfelel erre a célra a modell egy része is, igy a rendszerre felirható mérlegegyenletek. Ezek teljesülése ui. szükséges feltétele annak, hogy a változók összessége egy lehetséges üzemállapotnak feleljen meg. Ugyanakkor a mérlegegyenletek bizonyos változók között elvileg is pontos lineáris kapcsolatot jelentenek, igy lehetővé teszik azt, hogy bonyolult nemlineáris rendszerek esetén is a hibaellenőrzés céljaira lineáris részmodellt használjunk.

A vegyiparban és a vele rokon iparokban, mint a kohászat, kőolajfeldolgozás stb., ahol ömlesztett anyagok átalakitása, feldolgozása folyik, ilyen részmodell a tömegmérleg, a komponensmérlegek összessége, esetleg az entalpiamérleggel kibővitve. Folytonos üzemekben az áramló mennyiségek közötti mérlegek alkalmazását korlátozza, illetve pontosságukat csökkenti az, hogy nem állandósult állapotban a készülékek tárolókapacitásai forrásként vagy nyelőként jelentkeznek és ezeknek a mennyiségeknek a mérése legtöbbször nincs megoldva. Ez a probléma megoldható ugy, hogy hosszabb időtartamra integrált mennyiségekre értelmezzük a mérlegegyenleteket, akkor ui. a kapacitások véges volta miatt az ebből származó relativ hiba csökken [42], vagy ugy, hogy felhasználjuk a rendszer közelitő lineáris dinamikus modelljét [14]. Végül, ha nem szükséges rendszeresen vagy tetszőleges időpontban végrehajtani, az is lehetséges, hogy az ellenőrzést csak a jó közelitéssel állandósult állapotokban végezzük, amikor is ez a hiba nem jelentkezik.

Bármennyire is nyilvánvaló volt, hogy a mérési hibák kiegyenlitése csak olyankor megengedett, ha rendkivüli hibák nincsenek, ennek ellenőrzésére az értekezés szerzőjének Inzelt Péterrel és Jobbágy Máriával, mint társszerzőkkel publikált közleménye [2] előtt az irodalomban egzakt módszert nem javasoltak. Ezt követően jelent meg Václavek egy tanulmánya az ellenőrzés elvéről, ez azonban csak a hipotézisvizsgálat elemi alapelveit ismerteti, de konkrét módszert nem. Egy másik közlemény [31] szintén foglalkozik a mérések elfogadhatóságának vizsgálatával, konkrét algoritmust is javasolva, ez a vizsgálat azonban - ellentétben az általunk már előzőleg javasolttal - elvileg nem kellően megalapozott: a megengedett mérési hibák normális eloszlását feltételezve nem "legerősebb" és nem "megengedett". A mérések elfogadhatóságának kérdésével az értekezés 3. fejezetében részletesebben foglalkozunk.

A hibakiegyenlitéshez és ellenőrzéshez egyaránt szükséges varianciamátrix meghatározása meglehetős nehézségekkel jár. Az egyes méréshelyeken fellépő hibák varianciái, tehát a varianciamátrix átlós elemei még csak többé-kevésbé megbecsülhetők [9], de semmiképpen nem lehetséges ezen adatok alapján az átlón kivüli elemek becslése. Az értekezés erre a kérdésre két helyen is kitér: a 3.1.2 pontban tárgyalja a közös hibaforrásból eredő hibák kovarianciájának számitási lehetőségét, a 3.3 részfejezetben a mérések elfogadhatóságának ellenőrzését elemzi a hiba varianciamátrix előzetes ismerete nélkül.

A 3.4 részfejezet a véletlen és módszeres hibák megkülönböztetésének lehetőségét ismerteti a mérleghibák vizsgálata alapján. Az eddig ismert irodalom ezzel a kérdéssel sem foglalkozott.

1.3 A rendkivüli mérési hibák helye

Az ipari gyakorlat szempontjából fontos kérdés, hogy milyen módon lehet következtetni a rendkivüli hiba helyére, ha a mérések összessége elfogadhatatlannak minősül. A kérdés ilyen módon való felvetése eleve magában foglalja azt a feltevést, hogy elfogadhatatlannak minősitett mérések esetén nem az összes mérés hibája nagy, hanem azok közül csak egy, vagy legfeljebb kevés van rendkivüli hibával terhelve. Ez a feltevés azonban megengedhető, mert ellenkező esetben matematikai módszerek nem segitenek, és a teljes müszerpark felujitásra szorul. Gyakori ellenőrzés és rendszeres karbantartás mellett viszont annak a valószinüsége, hogy rendkivüli hiba több méréshelyen egyszerre lép fel - hacsak közös okuk nincs - rendkivül kicsi.

Régóta ismert tény, hogy elfogadhatatlanul hibás mérés esetén a rendkivüli hibával terhelt mérés helye nem egyezik meg szükségszerüen a maximális mértékben korrigált mérés helyével [35]. Ez éppen annak a következménye, hogy rendkivüli hiba esetén a hibák 0 várható értékü normális eloszlásának feltételezése nem helyes, tehát a becslés nem felel meg a legvalószinübb állapotnak. Az idézett közlemény azt javasolja, hogy a mérések közül sorra egyet-egyet a méretlenek közé sorolva ismételjük meg a hibakiegyenlitést /valójában a hiba mértékének kiszámitása is elegendő volna/, és azt a méréshelyet tekintsük rendkivüli hibával terheltnek, amelyiknek elhagyása a korrekciókat /vagy a hibamértéket/ a többinél egyértelmüen nagyobb mértékben csökkenti. Az eljárás kétségtelenül ésszerü, hibája azonban, hogy számitógépes megvalósitása meglehetősen körülményes, mert vagy minden variánsra minden alkalommal végig kell számolni az összes szükséges együtthatómátrixot, vagy ha az előre számitott együtthatókat tárolni akarjuk, a tárolandó együtthatómátrixok száma, illetve a szükséges memória mérete a mért változók számával szorzódik.

Egy másik, igen szemléletes módszer Václavektől származik [43].Eszerint méréshelyenként megvizsgálandó, hogy a hozzá kapcsolódó csomópontok mérlegei milyen mértékben hibásak. Rendkivüli hibával terheltnek az a méréshely tekintendő, amelyre a kapcsolódó két csomópont mérlege ellenkező értelmü nagy hibát mutat. Ha a javaslatot azzal módositjuk, hogy az egyes csomópontok rendkivüli hibáira a javasoltnál elméletileg megalapozottabb kritériumot alkalmazunk, akkor ez a módszer is célravezetőnek látszik. Az előzővel összehasonlitva ez kevésbé számitásigényes, minthogy itt méréshelyenként csak egyébként is ismert számok összehasonlitása szükséges.

Az értekezés szerzője Sztanó Tamással, mint társszerzővel az előzőktől eltérő algoritmust javasolt a rendkivüli hiba helyének keresésére [4]. Ez a módszer abból az elvi feltevésből indul ki, hogy egyidejüleg csak egy méréshely hibájának várható értéke különbözik 0-tól. Igy olyan algoritmus vezethető le, ami esetenként egyetlen mátrix-vektor szorzást igényel a hiba legvalószinübb helyének meghatározásához. Ezt az algoritmust az értekezés 6.fejezetében ismertetjük.

1.4 Mérlegegyenleteket kielégitő empirikus modellek

A mérlegegyenletekkel való ellentmondásmentesség kérdése az empirikus, vagy a közelitő matematikai modellekkel kapcsolatban is felvetődik. A vegyészmérnök nyilvánvalóan azt az igényt támasztja bármilyen matematikai modellel szemben, hogy az ne mondjon ellene a világképének alapjait jelentő megmaradási törvényeknek még akkor sem, ha együtthatói egyébként semmiféle "kézzelfogható" fizikai tartalommal nem birnak. Ez az elvárás azonban hibával terhelt megfigyelések esetében általában nem teljesül,hacsak az együtthatók becslése során arról valamilyen módon külön nem gondoskodunk. Mindezek ellenére tudomásom szerint ezzel a kérdéssel ezideig a szakirodalom nem foglalkozott. A mérlegegyenleteket kielégitő lineáris, vagy együtthatókban lineáris matematikai modellek együtthatóbecslését az értekezés szerzőjének egy közleménye [5] ismerteti /Sztanó Tamással, mint társszerzővel/,és az értekezés 4.fejezete tartalmazza. A dinamikus modellek és a mérlegegyenletek kapcsolatáról közlemény még nem jelent meg. Ezt a kérdést, beleértve a matematikai modellek mérlegegyenleteket kielégtő együtthatóinak becslését is, az értekezés 5.fejezete tárgyalja.

2 MEGMARADÁSI TÖRVÉNYEK ÉS MÉRLEGEGYENLETEK

Az alábbiakban röviden összefoglaljuk a mérlegegyenletekkel kapcsolatos fogalmakat és összefüggéseket. Nem célunk ezzel az összefoglalással uj elveket vagy megoldásokat adni, célunk csupán a dolgozat szóhasználatának és fogalomrendszerének egyértelmüvé tétele és elsősorban magának a mérlegegyenletek dolgozatban használt jelentésének tisztázása. Ugyanakkor rámutatunk a mérlegegyenleteknek és a fizika megmaradási törvényeinek kapcsolatára.

2.1 Megmaradási törvények

2.1.1 Abszolut és feltételes megmaradási törvények

Itt és a továbbiakban elemen azt a fizikai szubsztanciát értjük, amire a megmaradási törvényt értelmezzük. Ha a kémiában értelmezett elemeket, mint hidrogén, kálium stb. ettől meg kell különböztetni, azokat kémiai elemnek fogjuk nevezni. /Az elem szót használjuk még a megszokott halmaz-, vektor- vagy mátrixelem értelemben is, remélve, hogy ez nem okoz félreértést./

A megmaradási törvényeket abszolut, vagyis a körülményektől független érvényü, és feltételes, vagyis csupán bizonyos körülmények között érvényes megmaradási törvények osztályába sorolhatjuk. Utóbbi esetben a megmaradási törvények érvénye is a körülményektől függ. Mig pl. elválasztási müveletek során a kémiai vegyületekre is érvényesnek tekinthetjük a megmaradási törvényeket, egy atomreaktorban már a kémiai elemek megmaradási törvénye sem érvényes.

Az anyag hierarchikus felépitésének megfelelően a megmaradási törvények elemeit példaszerüen, a teljesség igénye nélkül a 2.1.táblázatban tüntetjük fel, elemenként egy-két olyan müvelettel és rendszerrel, amelynél az adott elemre vonatkozó megmaradási törvény és mérlegegyenlet alkalmazása célszerü.

Elemek	Müvelet	Rendszer
mérettel és egyértelmü alakkal biró tárgyak	raktározás, szerelés, vétel-eladás	raktár, mühely, kereskedelem
mérettel biró tárgyak	méret szerinti osztályozás	rosta, pneumatikus szállitás
vegyületek	összekeverés, diffuziós müveletek	csőhálózat, desztilláló stb. oszlopok
kémiai elemek	kémiai átalakitás	kémiai reaktor, kazán
elemi részecskék	nukleáris átalakitás	atomreaktor, izotóp előállitás
töltések	részecskefizikai átalakitás	gyorsitók, kozmikus sugárzás
tömeg		

2.1 táblázat

A táblázatban adott elemekre csak a velük egy sorban és az összes felettük lévő sorban szereplő müveletek kapcsán értelmezhetők a megmaradási törvények. Adott müveletek esetén pedig csak a velük egy sorban és az összes alattuk lévő sorban szereplő elemek megmaradási törvényei érvényesek.

A táblázatban szereplőkön kivül fennállnak a fizikából ismert abszolut megmaradási törvények az energiára, impulzusra, impulzusmomentumra és tömegközéppontra. A vegyészmérnök gyakorlati tevékenysége során ez utóbbiak közül az esetek többségében csak az energiára és esetleg az impulzusra állit fel mérleget.

Közismert, hogy a tömeg és az energia megmaradásának törvénye a tömeg-energia ekvivalencia értelmében egyenértékü, de a két megmaradási törvényt mégis egymástól függetlennek szokás tekinteni. Ennek az az oka, hogy az általános mérnöki gyakorlatban a nyugalmi tömegnek más energiafajtákká történő átalakulása az összes tömeghez viszonyitva olyan kis mértékü, hogy a mérési hibák miatt észlelhetetlen, mig a vele arányos energia átalakulás, vagyis a reakcióhő, fázisváltozási, szenzibilis stb. hő közönséges müszerekkel is jól mérhető.

2.1.2 Megmaradási egyenletek

Adott elem szempontjából zárt rendszeren a világnak egy olyan egyértelmüen meghatározott részét értjük, amelyben az adott elemre vonatkozó megmaradási törvény fennáll. Az az állitás, hogy az adott elem szempontjából zárt rendszerben a szóbanforgó elem mennyisége időben változatlan, a zárt rendszer definiciójának közvetlen következménye. Az ismert megmaradási tételek ilyen értelemben azzal az állitással egyenértéküek, hogy ilyen zárt rendszerek léteznek.

A megmaradási törvény képletszerü megfogalmazása a megmaradási egyenlet:

$$m(t2) = m(t1) \quad , \qquad t1,t2 \in T \qquad (2.1)$$

vagyis egy adott zárt rendszerben lévő m elemmennyiség a t1 és t2 időpontokban egyenlő, tetszőleges t1, t2 $\in T$ mellett.

T az abszolut érvényü megmaradási törvények esetében a valós számok $(-\infty,\infty)$ intervalluma, másküönben a megmaradási törvény érvényességi időintervalluma.

Szokás a megmaradási egyenleteket elemmennyiség helyett az elemsürüség térfogati integráljával felirni, mivel azonban a továbbiakban nem tárgyalunk térben folytonos eloszlásu rendszereket, ennek számunkra nincs jelentősége.

Szokásos másrészt a megmaradási törvényt a két tetszőleges időpontra vonatkozó egyenlőség helyett m(t) deriváltjával kifejezni:

$$\frac{d}{dt}\, m(t) = 0 \quad . \qquad t \in T \qquad (2.2)$$

A (2.1) összefüggés azonban fogalmilag egyszerübb és a belőle levezethető mérlegegyenletek általánosabbak, mivel az utóbbival ellentétben nem kell differenciálhatóságot feltételezni. Pl. csak egész értéket felvevő változók (darabáru) esetén differenciálhányadosról nem lehet szó.

2.2 Mérlegegyenletek

Mérlegegyenleteken a megmaradási törvénynek az adott elem vagy elemek szempontjából nyilt (vagyis nem zárt) rendszerekre való megfogalmazását értem.

Nem tekintem tehát mérlegegyenletnek az olyan összefüggést, amely valamilyen meg nem maradó mennyiség megváltozásával számol el, mint pl. az entrópia-"mérleg". Az olyan szóhasználat értelmében, amely ezeket is mérlegegyenletnek nevezi, az értekezés forrás nélküli mérlegegyenletekkel foglalkozik. Nagy gyakorlati jelentősége miatt eltekintek ettől a korlátozástól a reaktorok vegyületekre és konverziókra értelmezett mérlegei esetében. Ez formailag azért nem jelent nehézséget, mert az igy megfogalmazott mérlegegyenletek matematikailag a forrás nélküli mérlegekkel azonos módon tárgyalhatók.

Minthogy a mérgegyenletekkel kapcsolatban mindig feltételezzük a megmaradási törvény érvényességét, léteznie kell olyan zárt rendszernek, amelynek az általunk vizsgált nyilt rendszer vagy rendszerek a részrendszerei. Ha a teljes zárt rendszert nem ismerjük, a nyilt rendszer környezetével mindig kiegészithető zárt rendszerré. Igy a mérlegegyenletek felállitásakor mindig kiindulhatunk a részrendszerek összességére érvényes megmaradási egyenletből. Ez matematikailag megfogalmazva azt jelenti, hogy az "elemtartalom" a zárt rendszer részrendszereinek halmazán értelmezett additiv függvény.

A következőkben egy véges számu részrendszerre bontott zárt rendszert tekintünk. Kifejezzük a zárt rendszerben lévő elemmennyiséget, mint a részrendszerek elemtartalmainak összegét. Az elemátmenetekkel kifejezzük a nyilt részrendszerek elemtartalmának adott időintervallumbeli megváltozását. Igy a részrendszertartalmak és az elemátmenetek között lineáris feltételrendszert nyerünk. Ez a feltételrendszer képezi az adott összetett rendszer mérlegegyenleteit.

Jelöljük I-vel a vizsgált rendszer diszjunkt részrendszereinek halmazát, és egy-egy részrendszert jelöljünk általában i-vel, speciálisan $i1, i2, \ldots$-vel:

$$I = \{i1, i2, \ldots, i, \ldots in\} \quad .$$

Jelölje továbbá $m_I(t)$ a teljes zárt rendszer, $m_i(t)$ az i részrendszer elemtartalmát a t időpontban. Igy a nyilvánvaló

$$\sum_{i \in I} m_i(t) = m_I(t) \qquad (2.3)$$

összefüggésből a megmaradási egyenlet

$$\sum_{i \in I} m_i(t2) = \sum_{i \in I} m_i(t1) \tag{2.4}$$

alakba irható, amiből az elemtartalmak tetszőleges t1 időpont óta tetszőleges t1-nél későbbi t2 időpontig bekövetkezett megváltozására:

$$\sum_{i \in I} \Delta m_i(t1,t2) = 0 \tag{2.5}$$

adódik, mint a megmaradási egyenlet részrendszer elemtartalom változásokkal (növekedés) kifejezett alakja.

Rögzitsünk egy $t0 \in T$ időpontot.
Jelöljük $r_{i1,i2}(t)$-vel a t0 kezdő indőponttól tetszőleges t időpontig az $i1$ részrendszerből közvetlenül (vagyis más részrendszer érintése nélkül) az $i2$ részrendszerbe átment elemmennyiséget. Jelöljük $\Delta r_{i1,i2}(t1,t2)$-vel és nevezzük elemátmenetnek a tetszőleges t1 időponttól tetszőleges t2 időpontig $i1$-ből közvetlenül $i2$-be átment elemmennyiséget.
E szerint

$$\Delta r_{i1,i2}(t1,t2) = r_{i1,i2}(t2) - r_{i1,i2}(t1) \quad .$$

Az egyes részrendszerek elemtartalmának megváltozásai nyilván kifejezhetők az elemátmenetekkel:

$$\Delta m_{i1}(t1,t2) = \sum_{i \in I} \Delta r_{i,i1}(t1,t2) - \sum_{i \in I} \Delta r_{i1,i}(t1,t2) \tag{2.6}$$

tetszőleges $t1,t2 \in T$-re és minden $i1 \in I$-re.

Az összefüggés egyszerüsitése érdekében vezessük be az eredő elemátmenetek fogalmát. Jelöljük $s_{i1,i2}(t)$-vel a t0 kezdő időponttól tetszőleges t időpontig az $i2$ részrendszerből közvetlenül $i1$-be átment és az $i1$ részrendszerből közvetlenül $i2$-be átment elemmennyiségek különbségét:

$$s_{i1,i2}(t) = r_{i2,i1}(t)-r_{i1,i2}(t) \quad .$$

Jelöljük $\Delta s_{i1,i2}(t1,t2)$-vel és nevezzük <u>eredő elemátmenet</u>-nek a tetszőleges t1 időponttól tetszőleges t2 időpontig $i2$-ből közvetlenül $i1$-be átment, és $i1$-ből közvetlenül $i2$-be átment elemmennyiségek különbségét. Eszerint egyrészt

$$\Delta s_{i1,i2}(t1,t2) = s_{i1,i2}(t2)-s_{i1,i2}(t1) \quad ,$$

másrészt

$$\Delta s_{i1,i2}(t1,t2) = \Delta r_{i2,i1}(t1,t2)-\Delta r_{i1,i2}(t1,t2) \quad .$$

A (2.6) összefüggés az eredő elemátmenetekkel

$$\Delta m_{i1}(t1,t2) = \sum_{i \in I} \Delta s_{i1,i}(t1,t2) \quad . \tag{2.7}$$

A (2.6) és (2.7) összefüggések felirhatók mátrix irásmóddal is, az 1 összegező ("csupaegyes") vektor felhasználásával.

A t1 és t2 időpontok jelölését elhagyva legyen

$$\Delta m = (\Delta m_{i1}, \Delta m_{i2}, \ldots, \Delta m_{in})' \quad ,$$

$$\Delta R = \begin{pmatrix} \Delta r_{i1,i1} & \Delta r_{i1,i2} & \cdots & \Delta r_{i1,in} \\ \Delta r_{i2,i1} & \Delta r_{i2,i2} & \cdots & \Delta r_{i2,in} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots & \cdots\cdots \\ \Delta r_{in,i1} & \Delta r_{in,i2} & \cdots & \Delta r_{in,in} \end{pmatrix}$$

és

$$\Delta S = \begin{pmatrix} \Delta s_{i1,i1} & \Delta s_{i1,i2} & \cdots & \Delta s_{i1,in} \\ \Delta s_{i2,i1} & \Delta s_{i2,i2} & \cdots & \Delta s_{i2,in} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots & \cdots\cdots \\ \Delta s_{in,i1} & \Delta s_{in,i2} & \cdots & \Delta s_{in,in} \end{pmatrix}$$

Igy a (2.6) és (2.7) összefüggés mátrix irásmóddal*:

$$\Delta m = (\Delta R' - \Delta R) \cdot 1 \tag{2.8}$$

és mivel

$$\Delta S = \Delta R' - \Delta R \quad ,$$

következik, hogy

$$\Delta m = \Delta S \cdot 1 \tag{2.9}$$

A (2.6), (2.7) illetve (2.8), (2.9) összefüggések az adott egyelemü összetett rendszer mérlegegyenletei.

Ezek a mérlegegyenletek lineáris kapcsolatokat jelentenek a Δm_i elemtartalom megváltozások és a $\Delta r_{i1,i2}$ illetve $\Delta s_{i1,i2}$ elemátmenetek között. Mégis, a (2.8) és (2.9) összefüggések ezt a kapcsolatot nem a lineáris algebra megszokott vektortranszformációs alakjában irják le, mivel itt a mátrixelemek a változók, és az 1 vektor a transzformációs operátor. A Neudecker [32] által javasolt *vec*(•) operátor alkalmazásával (lásd az F.1.függeléket) azonban mindkét összefüggés homogén lineáris alakra hozható:

$$V_R \cdot \Delta v_R = 0 \quad ; \tag{2.1o}$$

ill.

$$V_\sigma \cdot \Delta v_\sigma = 0 \quad , \tag{2.11}$$

ahol V_R, illetve V_σ kizárólag *I* részrendszerének számától, azaz $n(I)$-től függő konstans mátrix. ($n(\bullet)$-nel a halmazok vagy vektorok elemeinek számát jelöljük.)

Az összefüggésekben

---

*A mátrix transzponáltját ´-vel jelöljük.

$$\Delta v_R = \begin{pmatrix} vec(\Delta R) \\ \text{---------} \\ \Delta m \end{pmatrix} ,$$

azaz részletezve

$$\Delta v_R = (\Delta r_{i1,i1}, \Delta r_{i2,i1}, \ldots, \Delta r_{in,i1}, \Delta r_{i1,i2}, \Delta r_{i2,i2}, \ldots$$
$$\ldots, \Delta r_{i1,in}, \Delta r_{i2,in}, \ldots, \Delta r_{in,in}, \Delta m_{i1}, \Delta m_{i2}, \ldots, \Delta m_{in})' ,$$

tehát Δv_R mérete:

$$n(\Delta v_R) = n(I) \cdot (n(I)+1) .$$

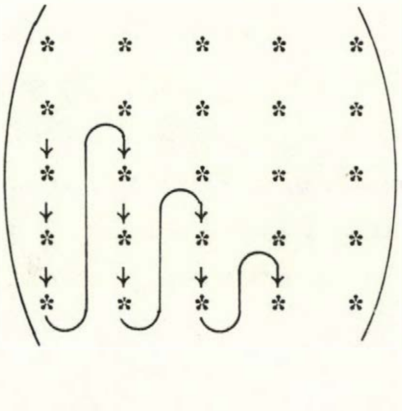
Másrészt

$$\Delta v_\sigma = \begin{pmatrix} \Delta\sigma \\ \text{----} \\ \Delta m \end{pmatrix} ,$$

ahol $\Delta\sigma$ a ΔS mátrix átló alatti elemeiből oszlopfolytonosan képzett $n(I) \cdot (n(I)-1)/2$ méretü vektor. ΔS ui. definiciójából következően antiszimmetrikus, igy átló alatti elemei egyértelmüen meghatározzák. Tehát

$$\Delta\sigma = (\Delta s_{i2,i1}, \Delta s_{i3,i1}, \ldots, \Delta s_{in,i1}, \Delta s_{i3,i2}, \ldots, \Delta s_{in,i2}, \ldots$$
$$\ldots, \Delta s_{in,i(n-1)})' ,$$

A $\Delta\sigma$ vektor képzését ΔS-ből az alábbi séma szemlélteti:



Tehát Δv_σ részletezve:

$$\Delta v_\sigma = (\Delta s_{i2,i1}, \Delta s_{i3,i1}, \ldots, \Delta s_{in,i1}, \Delta s_{i3,i2}, \ldots, \Delta s_{in,i(n-1)},$$
$$, \Delta m_{i1}, \Delta m_{i2}, \ldots, \Delta m_{in})' \quad .$$

Eszerint Δv_σ mérete:

$$n(v_\sigma) = n(I) \cdot (n(I)+1)/2 \quad .$$

A (2.1o) illetve (2.11) összefüggések levezetését, és a V_R, illetve V_σ mátrixok részletezését az F.2 ill. F.3 függelékben adjuk.

2.3 Többkomponensü rendszerek mérlegegyenletei

Az eddigiekben hallgatólag feltételeztük, hogy rendszerünkben egyetlen elem van és a mérlegegyenletek ennek a forgalmára vonatkoznak. Az alábbiakban több elemet tartalmazó rendszereket vizsgálunk.

Aszerint, hogy a szóbanforgó rendszerben egy vagy több elemet értelmezünk, beszélünk egy- ill. többkomponensü rendszerről. Itt és a továbbiakban a komponens szót a megszokottnál általánosabban használjuk, bármilyen "elem"-et érthetünk rajta.

Az elemek definiciója értelmében egyéb feltételek hiányában a mérlegek elemenként függetlenek, és külön-külön alkalmazhatók rájuk az előző pontban tárgyaltak. Közös változók által összekapcsolt mérlegekre vezet azonban, ha a bennük szereplő változók nem azok az elemek, amelyekre a rendszer megmaradási törvényei vonatkoznak. A kémiai és vegyipari gyakorlatban ez az eset gyakran fordul elő, ui. általában vegyületek vagy vegyületcsoportok mennyiségeit vagy áramait mérjük, a megmaradási törvények pedig kémiai reakció jelenlétében ezekre nem érvényesek. Ilyen esetekben a mérlegegyenletek felállitásának az a feltétele, hogy a komponensek egymásba való átalakulásának mennyiségi feltételeit ismerjük. Vegyületek és kémiai elemek esetében a sztöchiometriai egyenletek ezek az összefüggések. Ha a komponensek sztöchiometriai kapcsolatai ismertek, akkor - lényegében az azokat felépitő elemek megmaradási törvényeire alapozva - a többkomponensü rendszerek mérlegegyenleteihez hasonló módon jutunk el, mint egykomponensü esetben, kiegészitve az összefüggéseket részrendszerenként a komponenseknek a sztöchiometriai összefüggéseket kielégitő átalakulását leiró tagokkal. Az ezekben szereplő változók a különböző komponensek mérlegegyenleteinek közös változói. Ezek kapcsolják össze a különböző komponensek mérlegegyenleteit egyetlen összefüggő egyenletrendszerré.

Jelöljük K-val a rendszerben értelmezett komponensek halmazát:

$$K = \{k1, k2, \dots, k, \dots kn\} \quad .$$

Jelöljük L-lel a rendszerben értelmezett reakciókat és ennek egy-egy elemét általában ℓ-lel, speciálisan $\ell 1$, $\ell 2$,... ... ℓn-nel:

$$L = \{\ell 1, \ell 2, \dots \ell, \dots \ell n\} \quad .$$

Jelöljük továbbá $\nu_{\ell,k}$-val a k komponens <u>sztöchiometriai együtthatóját</u> az ℓ reakcióban (a képződő komponenseket tekintve pozitivnak) és legyen

$$\nu_k = (\nu_{\ell 1,k}, \nu_{\ell 2,k}, \dots, \nu_{\ell n,k})'$$

a k komponens együtthatójából képzett $n(L)$ elemü vektor és

$$N = \begin{pmatrix} \nu_{\ell 1,k1} & \nu_{\ell 1,k2} & \dots & \nu_{\ell 1,kn} \\ \nu_{\ell 2,k1} & \nu_{\ell 2,k2} & \dots & \nu_{\ell 2,kn} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \nu_{\ell n,k1} & \nu_{\ell n,k2} & \dots & \nu_{\ell n,kn} \end{pmatrix}$$

az együtthatók $n(L)\cdot n(K)$ méretü mátrixa.

Jelöljük $z_{i,\ell}(t)$-vel a rögzitett t0 kezdő időponttól tetszőleges t időpontig az ℓ reakcióban egységnyi sztöchiometriai együtthatóju komponensnek az i részrendszerben képződött mennyiségét. Jelöljük $\Delta z_i(t1,t2)$-vel és nevezzük átalakulásnak a tetszőleges t1 időponttól, tetszőleges t2 időpontig az ℓ reakcióban egységnyi sztöchiometriai együtthatóju komponensnek az i részrendszerben képződött mennyiségét. E szerint

$$\Delta z_{i,\ell}(t1,t2) = z_{i,\ell}(t2)-z_{i,\ell}(t1) \quad .$$

Az időpontok jelölését elhagyva, legyen

$$\Delta Z = \begin{pmatrix} \Delta z_{i1,\ell 1} & \Delta z_{i1,\ell 2} & \cdots & \Delta z_{i1,\ell n} \\ \Delta z_{i2,\ell 1} & \Delta z_{i2,\ell 2} & \cdots & \Delta z_{i2,\ell n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \Delta z_{in,\ell 1} & \Delta z_{in,\ell 2} & \cdots & \Delta z_{in,\ell n} \end{pmatrix}$$

ezen átalakulások $n(I)\cdot n(L)$ méretü mátrixa.

Többkomponensü rendszerek esetében az i részrendszer k komponenstartalmának [t1,t2]-beli megváltozását (növekedését) jelöljük $\Delta m_{i,k}$-val, a k komponenstartalom megváltozását az összes részrendszerre az $n(I)$ elemü Δm_k vektorral, és az összes komponenstartalom megváltozást az $n(I)\cdot n(K)$ méretü

$$\Delta M = \begin{pmatrix} \Delta m_{i1,k1} & \Delta m_{i1,k2} & \cdots & \Delta m_{i1,kn} \\ \Delta m_{i2,k1} & \Delta m_{i2,k2} & \cdots & \Delta m_{i2,kn} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \Delta m_{in,k1} & \Delta m_{in,k2} & \cdots & \Delta m_{in,kn} \end{pmatrix}$$

mátrixszal.

Egyszerü /azaz részrendszerekre nem osztott/ zárt rendszerben a komponenstartalmak megváltozása kizárólag az átalakulások következménye. Ezt az ismert sztöchiometriai egyenletek irják le. Jelöléseinkkel:

$$\sum_{\ell \in L} \Delta z_{\ell} \cdot \nu_{\ell,k} = \Delta m_k \qquad (2.12)$$

/Itt - tekintettel arra, hogy egyszerü rendszerről volt szó - az i indexeket elhagytuk./

Összetett rendszerben minden részrendszerre figyelembe vesszük komponensenként a részrendszerek közötti komponensátmeneteket és a reakciók következtében bekövetkező komponenstartalom megváltozásokat. Ezek együtt adják az adott komponens adott részrendszerbeli mennyiségeinek megváltozását. Rövidség kedvéért csak a $\Delta s_{i1,i2,k}$ eredő komponensátmenetekkel foglalkozunk /$i1$, $i2 \in I$ és $k \in K$/.

Az eredő komponensátmeneteket az eredő elemátmenetekkel analóg módon jelöljük, a komponensnek megfelelő indexszel is ellátva. Igy $\Delta s_{i1,i2,k}$ a [t1,t2] időintervallumban az $i1$ részrendszerből közvetlenül az $i2$-be átjutott k komponens eredő mennyiségét jelöli.

Képezzük komponensként az egykomponensü rendszereknél tárgyalt módon ezekből az $n(I) \cdot n(I)$ méretü antiszimmetrikus ΔS_k mátrixokat, ezek főátló alatti elemeiből oszlopfolytonosan az $n(\sigma)$ elemü $\Delta\sigma_k$ vektorokat, végül ezek egymás mellé irásával a

$$\Delta\Sigma = (\Delta\sigma_{k1}, \Delta\sigma_{k2}, \ldots, \Delta\sigma_{kn})$$

mátrixot.

Ezen jelölések bevezetésével a k komponens mennyiségének [t1,t2] időintervallumbeli megnövekedése az $i1$ részrendszerben

$$\sum_{i2\in I}\Delta s_{i1,i2,k}+\sum_{\ell\in L}\Delta z_{i1,\ell}\cdot\nu_{\ell,k}=\Delta m_{i1,k}\quad . \qquad (2.13)$$

Ebből a k komponens mérlegegyenletei az F.3 függelékben definiált C_σ együtthatómátrixszal:

$$C_\sigma\cdot\Delta\sigma_k+\Delta Z\cdot\nu_k=\Delta m_k\quad . \qquad (2.14)$$

A valamennyi megváltozást leiró mátrix egyenlet ebből, a Δm_k vektorok egymás mellé irásával:

$$C_\sigma\cdot\Delta\Sigma+\Delta Z\cdot N=\Delta M\quad , \qquad (2.15)$$

ahol

$$\Delta M=(\Delta m_{k1},\Delta m_{k2},\ldots,\Delta m_{kn})\quad .$$

Ez az összefüggés foglalja magába a többkomponensü összetett rendszer mérlegegyenleteit. Ezek a mérlegegyenletek lineáris kapcsolatot jelentenek a $\Delta m_{i,k}$ tipusu komponenstartalom megváltozások, a $\Delta s_{i1,i2,k}$ tipusu komponens átmenetek és a $\Delta z_{i,\ell}$ tipusu komponens átalakulások között. A (2.15) összefüggésben a $\Delta\Sigma$ változó jobbról, a ΔZ változó balról szorozza a rendszer szerkezetét leiró C_σ, illetve sztöchiometriai kapcsolatait kifejező N együtthatómátrixokat, a mátrixegyenlet megoldása tehát a lineáris algebra megszokott fogalomrendszerének keretei között nem formalizálható. A már az előzőkben is alkalmazott $vec(\cdot)$ operátor alkalmazásával azonban az összefüggés az összes változóra kifejezett homogén lineáris egyenletrendszerré transzformálható:

$$V_K\Delta v_K=0\quad . \qquad (2.16)$$

Ebben az összefüggésben V_K állandó, csak $n(I)$-től, $n(K)$-tól, $n(L)$-től és N-től függ, Δv_K pedig

$$\Delta v_K = \begin{pmatrix} vec(\Delta\Sigma) \\ \hline vec(\Delta Z) \\ \hline vec(\Delta M) \end{pmatrix} .$$

A (2.16) összefüggés levezetését az F.4 függelék tartalmazza a V_K mátrix részletezésével együtt.

2.4 A változók szelektálása

A (2.11) illetve (2.16) összefüggések elvi jelentősége, hogy származtatásuk megmutatja a megmaradási törvények és a mérlegegyenletek kapcsolatát. A gyakorlatban ezeket ilyen alakban ritkán használjuk, mert a részrendszerek közötti teljes kapcsolat gráfot feltételezik, vagyis a részrendszerek közötti összes elképzelhető eredő elem illetve komponensátmenetet tartalmazzák. Ez az eset a valóságban nemigen fordul elő, sokkal gyakoribb az, amikor a valóságos kapcsolatok az összes elvileg lehetségesnek csak kis hányadát teszik ki. A levezetés során mégis a teljes gráf feltételezése volt célszerü, mert ez áttekinthetővé és egyszerüvé tette a változók jelölését, és ezen keresztül a mérlegegyenletek felállitását.

Megjegyezzük, hogy a ΔS elem- ill. komponensátmenet mátrix ekvivalens a Kafarov [21] féle terminológia szerinti áramgráffal, feltéve hogy az utóbbiban bármely két részrendszer (csucs) között komponensként legfeljebb egy áram van.

Konkrét számitások során célszerütlen volna a nem létező kapcsolatoknak megfelelő átmeneteket jellemző változókat megtartani és valamennyinek 0 értéket adni. Hasonlóképpen célszerütlen volna a komponens átalakulásoknál is minden részrendben minden lehetséges reakciót értelmezni, mivel egy-egy reakció legtöbbször csak egy-két részrendszerre (a reaktorokra) korlátozódik.

korlátozódik.

Végül (tároló-)kapacitás nélküli részrendszerek esetén szükségtelenek az elem- illetve komponenstartalom megváltozásokat kifejező változók, minthogy ha a részrendszer nem tárol figyelembe veendő mennyiségü elemet illetve komponenst, akkor nyilvánvalóan annak változása is zérusnak tekintendő.

Gyakorlati számitások során elég a (2.11) ill. (2.16) összefüggések változói közül a valóban értelemmel biró-kat figyelembe venni, és a reális értelemmel nem biró változókat az azoknak megfelelő együtthatómátrix oszlopokkal együtt célszerü elhagyni. Ezek figyelembevételével a (2.11) ill. (2.16) összefüggés már alkalmas arra, hogy a gyakorlat által felvetett problémák megoldó algoritmusainak alapjául szolgáljon, beleértve az együtthatómátrixok számitógépes előállitását is.

Az eddigi elveknek megfelelően felállitott lineáris mérlegegyenleteket a továbbiak során indexelés nélkül

$$V \cdot \Delta v = 0 \tag{2.17}$$

val fogjuk jelölni.

A V mátrix nyilván $n(b) \cdot n(v)$ méretü, ahol $n(b)$ a mérlegegyenletek, $n(v)$ a mérlegegyenletekben szereplő változók száma. Az $n(v)$ elemü Δv vektor elemeit a továbbiakban mérlegváltozóknak fogjuk nevezni. V rangja gyakorlati esetekben kisebb a mérlegváltozók számánál. Feltehető továbbá az általánosság megszoritása nélkül, hogy sorainak száma a rangjával egyenlő:

$$r(V) = n(b) \quad ,$$

ellenkező esetben ui. a lineárisan függő sorok elhagyásával, a mérlegegyenletek tartalmi változtatása nélkül az egyenlőség elérhető.

Megjegyezzük, hogy egy komponens és tárolókapacitás nélküli részrendszerek esetében a nem létező kapcsolatoknak megfelelő oszlopok elhagyásával adódó V mátrix a rendszer elemeiből, mint csucspontokból. és az elemek közötti áramkapcsolatokból, mint élekből képzett irányitott gráf illeszkedési mátrixa.

2.5 Differenciális mérlegegyenletek

Eddig a mérlegegyenleteket 0-tól különböző, véges, pozitiv időintervallumra értelmeztük a 2.1.2 pontban kifejtett okok miatt. Folytonos üzemü technológiai rendszerek esetében azonban leggyakrabban az elemek áramlási sebességeit ismerjük közvetlenül /azaz elemmennyiség/idő dimenzióju mennyiségeket/. Az alábbiakban megmutatjuk, hogy az ezekre a mennyiségekre vonatkozó mérlegegyenletek könnyen származtathatók az időintervallumra értelmezett mérlegegyenletekből.

Induljunk ki ehhez a [t1,t2] intervallumra értelmezett (2.16) mérlegegyenletből és osszuk el azt t2-t1-gyel:

$$V\cdot\Delta v\cdot\frac{1}{t2-t1} = 0 \quad . \tag{2.18}$$

Ebben $\Delta v\cdot\frac{1}{t2-t1}$ nem más, mint a v integrális mérlegváltozó vektor differenciahányadosa. Ha a v vektor minden eleme az idő differenciálható függvénye, akkor rögzitett t1 mellett a szokásos $t2\to t1$ határátmenettel a

$$\lim_{t2\to t1} V\cdot\Delta v\cdot\frac{1}{t2-t1} = V\cdot\frac{dv}{dt} = V\cdot\dot{v} = 0 \tag{2.19}$$

differenciális mérlegegyenlet adódik, figyelembe véve, hogy V csak a rendszer szerkezetétől függ, tehát állandó. A Δv mérlegváltozó vektor elemei a 2.3 részfejezetbeli értelmezés szerint

$\Delta s_{i1,i2,k}$ tipusu elemátmenetek, $\Delta z_{i,\ell}$ tipusu átalakulások és $\Delta m_{i,k}$ tipusu elemtartalom változások.

A $\dot{v}$ differenciális mérlegváltozó vektor elemei ezek idő szerinti differenciálhányadosai, amik az alábbi közismert fogalmak:

$\dot{s}_{i1,i2,k}$ az $i1$ részrendszerből $i2$-be átáramló k komponens előjeles áramlási sebessége,
$\dot{z}_{i,\ell}$ az i részrendszerben lejátszódó ℓ átalakulás előjeles sebessége és
$\dot{m}_{i,k}$ az i részrendszerben tárolt k komponens mennyiségének előjeles megváltozási sebessége,

valamennyi mennyiség/idő dimenzióban.

Megjegyezzük, hogy $\dot{m}_{i,k}$ mérésére sokszor nincs közvetlen lehetőség. Ilyen esetben a differenciális mérlegegyenleteket csak akkor lehet alkalmazni, ha az elemtartalom változások viszonylag kis sebessége miatt az $\dot{m}_{i,k}$ tipusu változókat tartalmazó tagokat az $\dot{s}_{i1,i2,k}$ és $\dot{z}_{i,\ell}$ tipusu változókat tartalmazó tagok mellett el lehet hanyagolni, vagy ha az elemtartalom változási sebességeket a többi változó értékekből számitani lehet.

Ennek figyelembevételével természetesen a változók szelektálására a 2.4 részfejezetben tett megállapitások értelemszerüen a differenciális mérlegegyenleteknél is érvényesek.

Mindezekből a differenciális mérlegegyenletekre vonatkozóan az alábbi két következtetés is levonható:

Azonos részrendszer kapcsolatok esetén a mérlegegyenletek V együtthatómátrixa az időintervallumra értelmezett és a differenciális mérlegegyenleteknél azonos.

A kétféle mérlegegyenlet alakilag is azonos: mindkettő

$$\nabla \cdot v = 0 \qquad (2.2o)$$

alaku. Ebből kifolyólag a további fejezetekben tárgyaltak bármelyik módon értelmezett mérlegegyenletre egyaránt alkalmazhatók.

Rámutatunk végül arra, hogy ha $\dot{m}_{i,k} = 0$ minden i,k párra, akkor a (2.19) mérlegegyenletek a hálózatelmélet csomóponti Kirchhoff törvényét képviselik, a részrendszerekkel, mint csomópontokkal.

Itt jegyezzük meg, hogy olyan feladat is lehetséges, amikor részben differenciális, részben integrális mérlegváltozók között kell mérlegkapcsolatot megfogalmazni. Ilyen esetben a rendszer dinamikus leirására is szükség van. Ez az értekezés keretein kivülre vezetne, ezért ezzel a témával itt nem foglalkozunk.

2.6 Kiegészitő feltételek

Gyakorlati alkalmazások során előfordul, hogy a mérlegegyenleteket további változókkal és egyenletekkel célszerü kibőviteni. Bár az igy kibővitett egyenletrendszerek már kilépnek az eddigiekben tárgyalt, szigoruan a megmaradási törvényekre épülő valóságos mérlegegyenletek keretei közül, megengedhető és indokolt az ilyen bővités, ha a kiegészitő feltételek a megmaradási törvényekhez hasonló szigorusággal érvényesek. Az ilyen feltételi egyenleteknek a mérlegegyenletek közé sorolása különösen akkor indokolt, ha formailag sem jelentenek lényeges változást a mérlegegyenletek rendszerében, tehát ha a kiegészitő feltételek rendszere is lineáris.

Kiegészitő feltételi egyenlettel fogalmazható meg két komponensáram egyenlőségének előirása. Ez a gyakorlatban akkor fordulhat elő, ha egy elválasztási müveletnél az egyik komponens kizárólag az egyik áramban távozik: pl. kiforralás elhanyagolható tenzióju abszorbensből, vagy kondenzáció olyan gázelegyből, ahol a gáz nem kondenzálódó komponensei nem oldódnak a kondenzátumban.

Ilyen tipusu feltételre vezet, ha valamely áram összetétele rögzitett. Ez leggyakrabban olyan esetekben fordul elő, ha a rendszer egyik bemenete levegő.

Mind a kétféle kiegészitő feltételre bemutatunk egy-egy példát az F.5 függelékben.

2.7 Mért mennyiségekre vonatkozó mérlegegyenletek

Az előzőkben tárgyalt (2.2o) alaku mérlegegyenletek mindaddig csak elvi jelentőségüek, amig azokat a rendszer általunk nem ismert valódi változó értékeire vonatkoztatjuk. Kisérleti eredmények vagy üzemi mérések értékelése során azonban hibával terhelt mért mennyiségek közötti kapcsolatokról van szó. Ebben a részfejezetben ezt a kérdéskört elemezzük.

2.7.1 Ismeretlen mennyiségek számitása mérlegegyenletekből

A mindennapi gyakorlatban ritkán fordul elő, hogy a változók vektorának minden elemét mérjük. Vannak változók, amelyek értékét eleve pontosan ismerjük /igen gyakran tudjuk valamely komponens áramáról, hogy zérus/, másokat viszont éppen a mérlegegyenletekből kivánunk kiszámitani. Általában a változókat a rájuk vonatkozó ismereteink szerint három osztályba sorolhatjuk: a pontosan ismert értékü **w**, a mérés utján megfigyelhető értékü **x** és a méretlen /és ismeretlen értékü/ **y** változókra. Ezekkel a jelölésekkel

$$\begin{pmatrix} \mathbf{w} \\ \hline \mathbf{x} \\ \hline \mathbf{y} \end{pmatrix} = \mathbf{P}\mathbf{v} \qquad (2.21)$$

ahol P olyan $n(v)\cdot n(v)$ méretü permutáló mátrix, amely a v vektor elemeit a fentiek szerint rendezi át.

Minthogy a permutáló mátrixokra fennáll, hogy

$$P^{-1} = P' \quad ,$$

a (2.21) összefüggésből nyilván

$$Vv = VP'Pv = VP'\begin{pmatrix} w \\ \hline x \\ \hline y \end{pmatrix} = 0 \quad . \tag{2.22}$$

Vezessük be értelemszerüen a

$$VP' = (W \,|\, X \,|\, Y)$$

jelölést, ahol a W, X ill. Y mátrixok az eredeti V együtthatómátrix w, x ill. y vektorok kiválasztásának megfelelő $n(w)$, $n(x)$ ill. $n(y)$ számu oszlopából képzett $n(b)$ soru minorai. Igy a (2.17) ill. (2.19) összefüggés a

$$Ww+Xx+Yy = 0 \tag{2.23}$$

alakot ölti. Mivel mind W, mind w ismert és legtöbbször állandó, célszerü az

$$u = -Ww$$

jelölést bevezetni, amivel tehát a mérlegegyenletet az

$$Xx+Yy-u = 0 \tag{2.24}$$

alakban nyerjük. Az ismert vagy becsülhető mennyiségeket a

$$q = u-Xx$$

vektorba összevonva y-ra az

$$Yy = q \tag{2.25}$$

általános lineáris egyenletrendszer adódik. Az "általánosságon" itt azt értjük, hogy az ismeretlenek $n(\mathbf{y})$ száma és az egyenletek $n(\mathbf{q}) = n(\mathbf{b})$ száma nem feltétlenül egyenlő.

Ebben a pontban és a további fejezetekben azt a gyakorlati mérési hiba elemzés szempontjából érdekes esetet vizsgáljuk, amikor a mért és ismeretlen változók számának összege nagyobb a mérlegegyenletek számánál /feltételezve az előzők értelmében, hogy $\mathbf{V}$ mátrix rangja a sorok számával egyenlő/.

Ha az összeg az egyenletek számával egyenlő volna, akkor ui. valamennyi változó értéke a mérlegegyenletekből $\mathbf{u}$ ismeretében számitható lenne, tehát mérésekre nem volna szükség. Ha az összeg az egyenletek számánál kisebb lenne, a mérlegszámitás szempontjából a feladat értelmét vesztené.

A lineáris egyenletrendszerek megoldhatóságára vonatkozó ismert tételek értelmében (2.25)-ben

a/ $\mathbf{y}$-ra megoldás akkor és csak akkor létezik, ha a $\mathbf{q}$ vektor az $\mathbf{Y}$ együtthatómátrix oszlopainak lineáris kombinációja,

b/ ha van megoldás, az akkor egyértelmü, ha az $\mathbf{Y}$ mátrix oszlopai lineárisan függetlenek.

A b/ feltétel teljesülése a mérőhelyek megválasztásán mulik. Ebben a dolgozatban ezzel a kérdéssel részletesebben nem foglalkozunk. Csupán arra mutatunk rá, hogy a mérőhelyek helyes megválasztásának ellenőrzése éppen ezen feltétel vizsgálatával lehetséges. A kérdéskör részletesebb tárgyalása Václavek erre vonatkozó publikációjában található [45]. A b/ feltétel teljesülését a továbbiakban feltételezni fogjuk. Ellenkező esetben ui. a müszerezés nem teszi lehetővé, hogy a rendszer egészéről akárcsak közelitő információt is szerezzünk.

Az a/ feltételt a valóságos $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ és $\mathbf{u}$ vektorok az előző részfejezetek értelmében szükségszerüen kielégitik. Ha azonban a

(2.25) összefüggésben a sorok száma ($n(q)$) az ismeretlenek számánál ($n(y)$) nagyobb, akkor létezik olyan q vektor, amivel az egyenletrendszer ellentmondó, és ha q folytonos eloszlásu valószinüségi vektorváltozó, akkor az egyenletrendszer csak 0 valószinüséggel teljesül. Megjegyzendő, hogy a b/ feltétel teljesülése esetén mindig megoldható az $n(y) = n(q)$ eset, amikor a méréshelyek száma a minimálisan szükséges, az $n(q) > n(y)$ egyenlőtlenség pedig azt jelenti, hogy a minimálisan szükségesnél több helyen mérünk, és igy a "redundáns" mérések lehetővé teszik a mérési eredmények hihetőségének vizsgálatát.

Ha az a/ és b/ feltételek teljesülnek és $n(q) > n(y)$, továbbá rendelkezünk x-re valamiféle $\hat{x}$ becsléssel, akkor (2.24)-ből az y ismeretlenek $\hat{y}$ becslése meghatározható. Válasszunk ehhez egy olyan $n(q)\cdot n(q)$ méretü Q mátrixot, amelynek $n(y)$ sorát /jelöljük Q_1-gyel/ az Y oszlopai által kifeszitett altérre nem ortogonális $n(y)$ számu lineárisan független sorvektorok, fennmaradó $n(q)-n(y)$ sorát /jelöljük Q_2-vel/ Y oszlopaira ortogonális alteret kifeszitő lineárisan független sorvektorok képezik:

$$Q = \begin{pmatrix} Q_1 \\ \hline Q_2 \end{pmatrix} \quad .$$

Igy a Q_1Y szorzat nem szinguláris, és

$$Q_2Y = 0 \quad .$$

Ilyen Q mátrix létezik, mivel előzetes feltételezésünk értelmében $r(Y) = n(y)$.

A (2.24) összefüggés Q-val előlről megszorozva két részre bomlik:

$$Q_1Xx+Q_1Yy-Q_1u = 0 \tag{2.26}$$

és

$$Q_2Xx+Q_2Yy-Q_2u = 0 \quad . \qquad (2.27)$$

Az utóbbi, (2.27) összefüggésben az ismeretlen y-t tartalmazó tag zérus, igy ez feltételrendszer x-re: a (2.24) összefüggésnek csak az $n(q)-n(y)$ sorból álló

$$Q_2Xx-Q_2u = 0 \qquad (2.28)$$

feltételt kielégitő x-ekkel van megoldása.

Mivel Q_1 sorainak száma $n(y)$, következik hogy a (2.28) összefüggés az $n(x)$ számu mért változóra $n(q)-n(y)$ számu lineáris feltételt jelent. Az egyenletek és a változók számára vonatkozó egyenlőtlenség értelmében nyilván

$$n(x) > n(q)-n(y) \quad ,$$

vagyis a feltételrendszer a lehetséges x vektorok halmazát egy $n(x)+n(y)-n(q)$ dimenziós lineáris alakzatra korlátozza.

Ha már ismerjük x-nek egy (2.28)-at kielégitő $\hat{x}$ becslését, akkor y meghatározására a (2.26) összefüggés használható fel. Q_1 megválasztása miatt a Q_1Y szorzatnak van inverze, igy

$$\hat{Y} = (Q_1Y)^{-1}Q_1(u-X\hat{x}) \quad . \qquad (2.29)$$

Minthogy Q-t sokféleképpen választhatjuk, a feladat megoldására több lehetőség is kinálkozik.

Gyakorlatilag igen egyszerü algoritmushoz jutunk a

$$Q = \left(\begin{array}{c|c} I & 0 \\ \hline -Y_2Y_1^{-1} & I \end{array}\right) \qquad (2.30)$$

választással, ahol az $_1$ index a szóbanforgó mátrix $n(y)$

sorból álló felső, a $_2$ index $n(q)-n(y)$ sorból álló alsó minorára vonatkozik:

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ \hdashline u_2 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} X_1 \\ \hdashline X_2 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \hdashline Y_2 \end{pmatrix}$$

/Q ilyen megválasztásának természetesen az a feltétele, hogy Y_1^{-1} létezzék/. Igy az

$$(X_2-Y_2Y_1^{-1}X_1)\hat{x}-(u_2-Y_2Y_1^{-1}u_1) = 0 \qquad (2.31)$$

feltételrendszert és y kiszámitására az

$$y = Y_1^{-1}(u_1-X_1\hat{x}) \qquad (2.32)$$

összefüggést kapjuk.

Az algoritmus aránylag kis müveletigényü, mert a Q_1-gyel való szorzás valójában csak minor kiválasztásként jelentkezik. Hátránya, hogy előzetesen meg kell győződni Y_1 invertálhatóságáról.

A részletek ismertetése nélkül megjegyezzük, hogy ha Y_1-et nem kimondottan **Y** felső kvadratikus minorának, hanem alkalmas soraiból képzett invertálható minorának tekintjük, akkor az ismert Gauss eliminációs invertálási technikát igen egyszerüen lehet ugy módositani, hogy a teljes **Y** mátrixból kiindulva, az eliminációval egyidejüleg történjék meg azoknak a soroknak a kiválasztása, amelyekből képzett kvadratikus Y_1-nek létezik inverze [12]. Nyilvánvaló, hogy ebben az esetben az $_1$ index az igy kiválasztott sorokból képzett mátrixokat ill. vektort, a $_2$ index a fennmaradt sorokból tetszőleges, de valamennyi mátrixra ill. vektorra azonos sorrendben képzett minorokat jelöli. Hasonló módositással alkalmazható ugyanerre a célra az ortonormált Q transzformációs mátrixot előállitó Householder-féle **QR** transzformáció is /lásd pl. a [33] hivatkozást/. Ez utóbbi előnye a Gauss eliminációval szemben rosszul meghatározott /ill conditioned/ mátrixok esetében mutatkozik meg, igen jó numerikus stabilitásában.

Megjegyezzük, hogy Q_1-nek maga Y_1 is választható volna, ami y meghatározására a LKN módszer technikáját jelentené. Ez azonban az egyszerü eliminációnál müveletigényesebb és az előzőkhöz képest semmi előnyt nem jelent.

Az ismeretlen mennyiségek számitása tehát a mért mennyiségek egy becsléséből a (2.29) ill. speciálisan a (2.32) összefüggés szerint történhet, ha a méréshelyek megválasztása ezt lehetővé teszi. Ahhoz azonban, hogy az alapvető (2.20) mérlegegyenletnek egyáltalán legyen megoldása, a becsült értékeknek ki kell elégiteniök a (2.28) ill. speciálisan a (2.31) feltételrendszert.

Ha bevezetjük az

$$A = Q_2X \qquad \text{és} \qquad b = Q_2u$$

ill. speciálisan az

$$A = X_2-Y_2Y_1^{-1}X_1 \qquad \text{és} \qquad b = u_2-Y_2Y_1^{-1}u_1$$

jelöléseket, akkor a (2.28) ill. a (2.31) feltételrendszer az

$$\boxed{Ax-b = 0} \qquad (2.33)$$

alakba irható. A további tárgyalás során az összefüggést ebben az alakjában fogjuk felhasználni.

2.7.2 Speciális esetek

Az előző pontban azt a legáltalánosabb esetet tárgyaltuk, amikor a rendszer áramai között pontosan ismertek, hibával terhelt mérések utján ismertek és ismeretlenek egyaránt szerepelnek. Most röviden áttekintjük azokat a speciális eseteket, amikor ezek egyike-másika nem szerepel.

2.7.2.1

Pontosan ismert mennyiségek nincsenek:

A (2.22) összefüggésben w nem szerepel. A további összefüggések formálisan a

$$w = 0 \quad , \quad u = 0 \quad \text{és} \quad b = 0$$

helyettesitéssel érvényesek.

2.7.2.2

Ismeretlen mennyiségek nincsenek:

A (2.22) összefüggésben y, VP' felbontásában Y nem szerepel. A további összefüggésekben az ezek bármelyikét /beleértve Y minorait is/ szorzó tényezőként tartalmazó tagok zérusok. Az y számitására szolgáló (2.29) ill. (2.32) összefüggés értelmét veszti. A (2.33) összefüggés

$$A = X \quad \text{és} \quad b = u$$

helyettesitéssel érvényes.

2.7.2.3

Valamennyi változó mért mennyiség:

A változók becsült értékeivel a (2.20) összefüggésnek teljesülnie kell. A (2.33) összefüggés az

$$A = X = V \quad \text{és} \quad b = 0$$

helyettesitéssel érvényes.

2.7.2.4

Mért mennyiségek nincsenek:

A (2.22) összefüggésben **x**, VP´ felbontásában X nem szerepel. A további összefüggésben az ezek bármelyikét /beleértve X minorait is/ szorzó tényezőként tartalmazó tagok zérusok. A feladat csak akkor oldható meg egyértelmüen, ha Y kvadratikus és nem szinguláris. Ekkor:

$$y = Y^{-1}u \quad .$$

Az **x**-ekre vonatkozó feltételrendszer /(2.28) ill. (2.31)/ értelmét veszti.

A feladat ilyen formában tervezési számitásokban fordul elő.

2.7.2.5

Valamennyi változó ismeretlen:

A feladat értelmét veszti. Kizárólag mérlegegyenletekből, más információ nélkül a változók kiszámitása nyilván lehetetlen.

2.7.2.6

Valamennyi változó pontosan ismert:

A megoldás triviális. A változók pontos értékei szükségszerüen kielégitik a mérlegegyenleteket.

3 A MÉRÉSI HIBÁK ELEMZÉSE

Ez a fejezet az előzőnek arra a megállapitására épül, hogy a mérlegegyenletek a rendszer mérlegváltozói közötti lineáris kapcsolatok, és hogy a valóságos $\mathbf{x}$ mérlegváltozókra teljesül az

$$Ax-b = 0$$

feltételrendszer, ahol A $n(f)\cdot n(x)$ méretü,

$$r(A) = n(f)$$

rangu mátrix, ahol

$$n(x) > n(f) \quad .$$

Hibaelemzésen - a gyakorlat igényeinek megfelelően - az alábbi kérdések vizsgálatát értjük:

a/ A rendszerre vonatkozó előzetes ismereteink alapján elfogadhatónak tekinthetünk-e egy összetartozó mérést, vagy azok egy sorozatát?

b/ Mi a rendszer legvalószinübb állapota a mérések és az előzetes ismeretek figyelembevételével?

c/ Ha az a/ szerinti vizsgálat alapján a mérést vagy méréssorozatot nem fogadjuk el, vajon melyik méréshely a jelzett durva hiba legvalószinübb forrása?

3.1 A változók és eloszlásuk

3.1.1 Definiciók és jelölések

A 3.fejezetben az alábbi jelölési konvenció következetes alkalmazására törekszünk: a változó valóságos értékét a föléje irt $\vee$ jellel, mért, vagy a méréssel közvetlenül kapcsolatos értékét $\sim$ jellel, becsült értékét $\wedge$ jellel különböztetjük meg. A felső jelzés nélküli jelölést csak a változó megjelölésére általában, integrációs változóként vagy sürüségfüggvényének független változójaként használjuk.

Az $\mathbf{x}-\check{\mathbf{x}}$ különbséget általában hibának nevezzük és $\mathbf{d}$-vel jelöljük:

$$\mathrm{d} = \mathbf{x}-\check{\mathbf{x}} \quad .$$

Az $\mathbf{x}-\tilde{\mathbf{x}}$ különbséget általában korrekciónak nevezzük és $\mathbf{c}$-vel jelöljük:

$$\mathrm{c} = \mathbf{x}-\tilde{\mathbf{x}} \quad .$$

Az $\mathbf{Ax}-\mathbf{b}$ vektort általában mérleghibának nevezzük és $\mathbf{f}$-fel jelöljük:

$$\mathbf{Ax}-\mathbf{b} = \mathbf{f} \quad .$$

A felsorolt fogalmak valódi, mért és becsült mennyiségeinek definicióját a 3.1 táblázat foglalja össze.

3.1.2 A mérési hibák és mért értékek feltételezett eloszlása

Ebben a pontban tételesen felsoroljuk a továbbiakban alkalmazott feltevéseinket a mérési hibák eloszlására vonatkozóan.

3.1.2.1

A mérési hibák a mérlegváltozóktól függetlenek. Ebből következően

$$E(\tilde{\mathrm{d}}\check{\mathrm{x}}') = E(\tilde{\mathrm{d}})\cdot\check{\mathrm{x}}' \qquad (3.1)$$

3.1.2.2

A mérési hibák $n(\mathbf{x})$ változós együttes normális eloszlásuak:

$$\tilde{\mathrm{d}} \sim N_{n(\mathbf{x})}(\tilde{\Theta}, \mathrm{V}_{\tilde{\mathrm{d}}}) \qquad (3.2)$$

ahol $\tilde{\Theta}$ a $\tilde{\mathrm{d}}$ mérési hiba várható értéke, $\mathrm{V}_{\tilde{\mathrm{d}}}$ $\tilde{\mathrm{d}}$ varianciamátrixa.

	definició	$\check{}$: valódi	$\tilde{}$: mért	$\hat{}$: becsült
mérlegváltozó	x	$\check{x}$ a mérlegváltozó valódi értéke	$\tilde{x}$ a mérlegváltozó mért értéke	$\hat{x}$ a mérlegváltozó becsült értéke
hiba	$d = x-\check{x}$	$\check{d} = \check{x}-\check{x} = 0$ a valódi mérlegváltozó hibája,ami nyilván zérus	$\tilde{d} = \tilde{x}-\check{x} = -c$ a mérlegváltozó mérési hibája	$\hat{d} = \hat{x}-\check{x}$ a mérlegváltozó becslési hibája
korrekció	$c = x-\tilde{x}$	$\check{c} = \check{x}-\tilde{x} = -\tilde{d}$ az ideális korrekció	$\tilde{c} = \tilde{x}-\tilde{x} = 0$	$\hat{c} = \hat{x}-\tilde{x}$ a becsült korrekció
mérleghiba	$f = Ax-b$	$\check{f} = A\check{x}-b = 0$ a valódi értékekkel adódó mérleghiba, ami nyilván zérus	$\tilde{f} = A\tilde{x}-b$ a mért mérlegváltozókkal adódó mérleghiba	$\hat{f} = A\hat{x}-b$ a becsült mérlegváltozókkal adódó mérleghiba

3.1 táblázat

Jelölések áttekintése

Ezt a feltételezést gyakorlati számitások során igen gyakran alkalmazzák, ami olyankor, amikor a hiba igen sok független forrásból adódó véletlen változó összegeként adódik, az un. centrális határeloszlástételből következően elméletileg is alátámasztható. Mégis, néha a mérési hibák eloszlása ettől jelentősen eltérhet. Az ebben a fejezetben leirt algoritmusok alkalmazása előtt feltétlenül meg kell győződni, hogy a normális eloszlás feltételezése fenntartható-e. Ellenkező esetben a hipotézisvizsgálat során a hibás döntés valószinüsége nem fog megfelelni az előirt szignifikanciaszintnek és a becslés tulajdonságaira vonatkozó állitásaink /maximális valószinüség, minimális variancia, torzitatlanság/ általában nem lesznek helytállók. Ilyenkor egyedileg kell a problémát megvizsgálni, hogy az algoritmusok a gyakorlat igényeit kielégitik-e vagy sem. Könnyen előfordulhat pl., hogy a feltételezettől eltérő hibaeloszlás miatt a korrigált mérlegváltozók között negativ /a többi komponenssel ellenkező irányu/ komponensáram is fellép, ami aligha tekinthető a legvalószinübb üzemállapotnak.

3.1.2.3

A mérési hibák O várható értéküek:

$$\tilde{\Theta} = E(\tilde{d}) = 0 \qquad (3.3)$$

A mérési hibák elfogadhatóságának vizsgálatával foglalkozó 3.2.3 részfejezet ezen feltétel ellenőrzésére javasol algoritmust. A O-tól különböző várható érték további vizsgálatával ennek a fejezetnek a 3.3 és 3.4 részfejezete is foglalkozik.

3.1.2.4

A mérések hibáinak korrelálatlanságát a fejezetben nem tételezzük fel. A hibák $V_{\tilde{d}}$ varianciamátrixa tehát nem szükségszerüen diagonális, de természetesen szimmetrikus, nemnegativ definit /pozitiv definit vagy szemidefinit/ mátrix.

Az alkalmazás oldaláról tekintve ez azt jelenti, hogy figyelembe tudjuk venni, ha valamelyik méréshelyen fellépő hiba más méréshelyeken jelentkező hibákkal korrelációban van. Ezeket a kapcsolatokat a varianciamátrix átlón kivüli elemeinek 0-tól különböző értéke fejezi ki.

Nehézséget jelenthet ezeknek a kovarianciáknak meghatározása a gyakorlatban. A mérések utján történő meghatározás igen nehézkesnek és nehezen megvalósithatónak látszik: független, nagy pontosságu mérőmüszerekkel kellene az adott helyszinen párhuzamos ellenőrző méréssorozatot végezni, majd az igy kapott eredményeket statisztikailag értékelni. Erre üzemi körülmények között aligha van mód és ilyen mérésekről nincs is tudomásunk.

A nem diagonális varianciamátrixra vonatkozó feltételezés ennek ellenére nem csupán formális. A varianciamátrix statisztikusan nem független hibák esetére több-kevesebb közelitéssel számitás utján is meghatározható, ha feltételezni lehet, hogy a mérési hibák két független összetevőből adódnak: egy méréshelyenként független, tehát diagonális varianciamátrixu $\tilde{e}$ és egy közös $\tilde{g}$ hibaforrástól determinisztikusan lineárisan függő tagból. Ilyen közös hibaforrás lehet a müszerek tápfeszültségének vagy a légnyomásnak a változása, a környezeti hőmérséklet ingadozása stb.

A számitáshoz természetesen ismerni kell azt az $n(x)\cdot n(g)$ méretü Γ együtthatómátrixot, amelynek $\gamma_{i,j}$ eleme az i-edik mérlegváltozó mérési hibájának a $\tilde{g}$ közös hibaforrásvektor j-edik elemétől való függésének együtthatója. Igy

$$\tilde{d} = \tilde{e}+\Gamma\tilde{g} \quad . \qquad (3.4)$$

Az $\tilde{e}$ és $\tilde{g}$ hibák függetlenségére tett feltételezés következményeként az eredő $\tilde{d}$ mérési hibavektor varianciamátrixa

$$V_{\tilde{d}} = E(\tilde{d}\tilde{d}') = E(\tilde{e}\tilde{e}'+\Gamma\tilde{g}\tilde{g}'\Gamma') = V_{\tilde{e}}+\Gamma V_{\tilde{g}}\Gamma' \quad . \qquad (3.5)$$

Megjegyezzük, hogy ezzel az eljárással kezelhető - bizonyos elhanyagolással - az a gyakorlatban igen gyakran előforduló eset is, amikor a mérlegekben szereplő komponensáramok valójában egy közös tömegáram és külön-külön mért összetételek szorzatai. Ilyenkor a tömegáram mérési hibáját tekinthetjük közös hibaforrásként. Γ megfelelő elemeit ezesetben éppen maguk a koncentrációk jelentenék, de ha relativ változásuk nem tulságosan nagy, akkor azok az átlagos értékekkel közelithetők. Ez is egy lehetőség a bilineáris mérlegegyenletek kiegyenlitésének közelitő megoldására.

3.1.2.5

Feltételezzük, hogy a mérési hibák tere nem elfajuló, vagyis hogy a hibavektorok kifeszitik a mérlegváltozók teljes $n(\mathbf{x})$ dimenziós terét. Ebből következik, hogy varianciamátrixuk határozottan pozitiv definit, tehát nem szinguláris és igy létezik inverze.

Ez a feltételezés valójában már következménye annak az előzőkben is emlitett feltevésnek, hogy statisztikusan összefüggő hibák esetében is van a mérési hibáknak statisztikusan független összetevője. Itt külön hangsulyozzuk, hogy ez minden méréshelyre valóban létezik; tehát $V_{\tilde{e}}$ határozottan pozitiv definit. Igy $\Gamma V_{\tilde{g}}\Gamma'$ nemnegativ definit voltából következik, hogy a feltétel teljesül. Mivel a mérések mindig hibával terheltek, ez a feltétel a valóságnak mindig megfelel, ha minden mérlegváltozót valóban függetlenül mérünk, vagy legalábbis független mérések eredményeiből számitjuk azokat.

3.1.2.6

A mért értékek $\tilde{x}$ vektora a valóságos $\check{x}$ értékeket terhelő mérési hibák következtében szintén valószinüségi változó. Rögzitett $\check{x}$ mellett, O várható értékü $\tilde{d}$ hiba esetén

$$\tilde{x} \sim N_{n(x)}(\check{x}, V_{\tilde{d}}) \qquad (3.6)$$

3.2 A mérleghibák és a mérési hibák kapcsolata

3.2.1 A mérési hibákra vonatkozó feltételrendszer

Az $\tilde{f}$ mérleghiba vektor a 3.1.1-beli definició szerint

$$\tilde{f} = A\tilde{x}-b \quad . \qquad (3.7)$$

Felhasználva az ugyanott található

$$\tilde{d} = \tilde{x}-\check{x} \qquad (3.8)$$

és

$$\check{f} = A\check{x}-b = 0 \qquad (3.9)$$

összefüggéseket, az $\tilde{f}$ mérleghiba és a $\tilde{d}$ mérési hibavektor között a homogén lineáris

$$\boxed{\tilde{f} = A\tilde{d}} \qquad (3.1o)$$

kapcsolat adódik.

Ez az összefüggés a mérési hibák elemzése szempontjából alapvető jelentőségü, mert kapcsolatot teremt a (3.7) összefüggés szerint a mérési adatokból kiszámitható mérleghiba és a megismerhetetlen mérési hibák között, kiküszöbölve a (3.8) összefüggésben szereplő $\check{x}$ valóságos mérlegváltozó értékeket. (3.1o) természetesen nem alkalmas arra, hogy belőle a $\tilde{d}$ mérési hibát kiszámitsuk, mert a független mérlegegyenletek száma nem érheti el a mérlegváltozók számát, és igy A sorainak száma $n(x)$-nél kisebb. A hibaelemzés során viszont éppen a (3.1o) összefüggés révén hasznositjuk az $\tilde{f}$ mérleghibákban rejlő információt.

(3.1o)-ből következően az $\tilde{f}$ mérleghiba vektor várható értéke

$$E(\tilde{f}) = E(A\tilde{d}) = A\tilde{\Theta} \quad .$$

0 várható értékü hibák esetén tehát

$$E(\tilde{f}) = 0 \quad .$$

$\tilde{f}$ varianciája nyilván

$$V_{\tilde{f}} = E((\tilde{f}-E(\tilde{f}))\cdot(\tilde{f}-E(f))') = AV_{\tilde{d}}A' \quad ,$$

$\tilde{d}$ várható értékétől függetlenül. 0 várható értékü normális eloszlásu hibák esetén a belőle homogén lineáris transzformációval képzett $\tilde{f}$ valószinüségi vektorváltozó is 0 várható értékü és normális eloszlásu:

$$\tilde{f} \sim N_{n(f)}(0, AV_{\tilde{d}}A') \quad . \tag{3.11}$$

3.2.2 A mérlegegyenletek normált alakja

A mérlegegyenletek és a belőlük levezetett (3.1o) feltételrendszer az együtthatók és változók alkalmas transzformációjával olyan normált alakra hozható, amely a további elemzést egyszerübbé és áttekinthetőbbé teszi.

Felhasználva azt, hogy $V_{\tilde{d}}$ és $AV_{\tilde{d}}A'$ szimmetrikus és pozitiv definit, tehát létezik valós négyzetgyöke, vezessük be az alábbi jelöléseket:

$$G = (AV_{\tilde{d}}A')^{-1/2}AV_{\tilde{d}}^{1/2} \quad , \tag{3.12}$$

$$h = (AV_{\tilde{d}}A')^{-1/2}b \quad , \tag{3.13}$$

$$\xi = V_{\tilde{d}}^{-1/2}x \tag{3.14}$$

$$\delta = V_{\tilde{d}}^{-1/2} d \tag{3.15}$$

$$\gamma = V_{\tilde{d}}^{-1/2} c \tag{3.16}$$

$$\varphi = (AV_{\tilde{d}}A')^{-1/2} f \quad , \tag{3.17}$$

ahol a mátrix $1/2$ hatványán a csupa pozitiv saját értékü négyzetgyököt értjük.

Behelyettesitéssel adódik a

$$G\xi - h = \varphi \tag{3.18}$$

mérlegegyenlet és a

$$G\delta = \varphi \tag{3.19}$$

feltételrendszer.

Ha a transzformált változókra is értelmezzük a 3.1.1 pontban definiált $^\vee$, $^\sim$ és $^\wedge$ szimbólumokat, ugy azokra is értelmezhető a

$$\delta = \xi - \check{\xi}$$

és

$$\gamma = \xi - \tilde{\xi}$$

kapcsolat és a 3.1.táblázat a megfelelő görög betükkel jelölt transzformált együtthatókkal a normált ξ, δ és γ változókra analóg módon értelmezhető.

Mivel a 3.2.1 pont szerint $V_{\tilde{d}}$ szimmetrikus és határozottan pozitiv definit, és mivel **A** rangja sorainak számával egyenlő, a transzformáció létezik és kölcsönösen egyértelmü, a transzformált mennyiségek pedig valósak.

Belátható, hogy a normálással mind a mérési hibavektort, mind a mérleghibavektort független, egységszórásu valószinüségi vektorváltozóvá transzformáltuk:

$$V_{\tilde{\delta}} = I_{n(\mathbf{x})} \quad (3.2o)$$

és

$$V_{\tilde{\varphi}} = I_{n(\mathbf{f})} \quad (3.21)$$

és mivel a transzformáció lineáris, a változók eloszlása normális marad. O várható értékü hiba esetén tehát

$$\tilde{\delta} \sim N_{n(\mathbf{x})}(O,I) \quad (3.22)$$

és

$$\tilde{\varphi} \sim N_{n(\mathbf{f})}(O,I) \; . \quad (3.23)$$

G definiciójából következően

$$GG' = I_{n(\mathbf{f})} \; . \quad 3.24)$$

A transzformáció fontos, a továbbiak során kihasználásra kerülő tulajdonsága, hogy

a/ ξ, δ és γ invariáns $\mathbf{x}$ léptékének megválasztására,

b/ $|\varphi|$ ill. $\varphi'\varphi$ invariáns mind $\mathbf{x}$ léptékének megválasztására, mind a mérlegegyenletek ekvivalens lineáris transzformációjára.

Az invariancia igazolása az F.6 függelékben található.

Megjegyezzük, hogy a transzformációt legtöbbször nem szükséges numerikusan megvalósitani. A transzformációs képletekben szereplő viszonylag nagy müveletigényü mátrix négyzetgyökszámitás elkerülhető, ha a levezetett végeredményeket az eredeti változókra képletszerüen visszatranszformáljuk. Ha valami okból a transzformációt numerikusan mégis meg akarjuk valósitani, a mátrix négyzetgyökvonásra jól konvergáló iterativ algoritmust ajánlunk az F.7 függelékben. Ennek előnye, hogy nincs szükség hozzá a szóbanforgó mátrix főtengelytranszformációjára.

3.2.3 A mérések elfogadhatóságának vizsgálata

3.2.3.1

Első pillantásra kézenfekvőnek tünnék az összetartozó mérlegek utján történő ellenőrzésére az $\tilde{f}$ mérleghiba vektor abszolut értékét, vagy ami azzal lényegében egyenértékü, annak négyzetét $\tilde{f}'\cdot\tilde{f}$-ot mint hibamértéket felhasználni: ha ez az érték elég kicsi, a mérést elfogadjuk, ha nem, a mérést elfogadhatatlannak minősitjük. Azonnal látható azonban, hogy a hibamérték ilyen definiciója még azoknak a legelemibb feltételeknek sem tesz eleget, amiket a mérések elfogadhatóságának ellenőrzésével kapcsolatban meg kell követelnünk. $\tilde{f}'\cdot\tilde{f}$ választása ui. önkényes és a probléma lényegét egyáltalán nem érintő momentumoktól is függ. A (3.7) összefüggés felirása ui. - amiből voltaképpen $\tilde{f}$-ot számitjuk - véletlenszerü, minthogy egy adott rendszer mérlegeit ekvivalens módon végtelen sokféleképpen megadhatjuk, és egy ilyen megadás tetszőleges kölcsönösen egyértelmü lineáris transzformációja az eredeti mérlegekkel egyenértékü, mégis ugyanazon $\mathbf{x}$ értékekre különböző $\tilde{f}'\cdot\tilde{f}$ hibamértéket ad. Hasonló a helyzet a mérlegváltozók léptéktranszformációjával is.

Mint azt az előző, 3.2.2 pontban beláttuk, a mérlegegyenletek (3.12)-(3.19) szerint definiált normált alakjában szereplő $\tilde{\varphi}$ normált mérleghiba vektorral képzett

$$q^2 = \tilde{\varphi}'\tilde{\varphi} \qquad (3.25)$$

<u>hibamérték</u> kielégiti az előzőkben hiányolt <u>invariancia</u> követelményeit: független $\mathbf{x}$ elemeinek mértékegységétől, valamint a mérlegegyenletek felirásának módjától.

Minthogy $\tilde{\varphi}$ (3.23) értelmében elemenként független, O várható értékü, egységszórásu, normális eloszlásu valószinüségi változó, q^2 nyilvánvalóan $n(f)$ számu ilyen négyzetének öszszege, tehát $n(f)$ szabadsági foku, centrális χ^2 eloszlásu valószinüségi változó:

$$q^2 \sim \chi^2_{n(f)} \qquad (3.26)$$

Megjegyezzük, hogy q^2 egyenlő a ξ mérlegváltozók terében a $\tilde{\xi}$ mért értékek által meghatározott pontnak a mérlegegyenleteket kielégitő pontokból képzett lineáris alakzattól való távolságával is. Ez a megállapitás a következő, 3.2.3 ponthoz kapcsolódó F.9 függelékben szereplő levezetésből következik.

Az összetett mérések elfogadhatóságának vizsgálata a matematikai statisztika hipotézisvizsgálat témakörébe tartozik [33],[48]: azt a hipotézisünket kivánjuk ellenőrizni, hogy a mérési hibák eloszlása megfelel a 3.1.2 pontban feltételezettnek, beleértve a hibák 0 várható értékét.

A hipotézisvizsgálat mindig két hipotézis, az eredetileg feltételezett un. H_o nullhipotézis és egy H' ellenhipotézis szembeállitása és a rendelkezésre álló bizonytalan információ alapján annak eldöntése, hogy a nullhipotézis fenntartható-e.

Nullhipotézisünk az eddigiek értelmében az, hogy

$$H_o : \tilde{d} \sim N_{n(x)}(0, V_{\tilde{d}}) \quad . \qquad (3.27)$$

Az ellenhipotézis azonban egyáltalán nem ilyen egyértelmü. Tekinthetnénk azt, hogy a hiba nem normális, hanem valamilyen ettől eltérő eloszlásu, azt, hogy normális, de valamilyen $V_{\tilde{d}}$-tól különböző $V^*_{\tilde{d}}$ varianciáju, vagy azt, hogy $V_{\tilde{d}}$ varianciáju normális, de 0-tól különböző várható értékü, stb.

Mind az ésszerü müszaki megfontolások, mind a viszonylag egyszerü matematikai kezelhetőség ez utolsó ellenhipotézist indokolja:

$$H' : \tilde{d} \sim N_{n(x)}(\tilde{\Theta}, V_{\tilde{d}}) \quad , \tag{3.28}$$

ahol $\tilde{\Theta} \neq 0$ és tetszőleges, ismeretlen.

A normális eloszlás feltételezésének elvetése a feladat matematikai kezelését teszi reménytelenné. A variancia, ill. várható érték változása közül azért esik az utóbbira a választás, mert - müszakilag fogalmazva - ellenhipotézisként a nullpont eltolódására sokkal inkább gyanakszunk, mint arra, hogy a mérőmüszereink "feloldóképessége" csökkent, vagy a "mérési zaj" mértéke nőtt volna meg.

Az az ellenhipotézis, hogy a várható érték 0-tól különböző, azt jelenti, hogy nem egyetlen konkrét eloszlást állitunk szembe a (3.27) szerinti nullhipotézissel, hanem eloszlásoknak egy halmazát, ellenhipotézisünk tehát a megszokott terminológia szerint <u>összetett</u> /composite/. Ezért nem létezik egyértelmüen legerősebb vizsgálat a (3.27) és (3.28) hipotézisek közötti döntésre. Az <u>F.8 függelék</u> azonban azt bizonyitja, hogy a (3.25) szerint számitott q^2-tel a

$$\begin{array}{ll} (q^2 \leq \chi^2_{n(f),\alpha}) & H_0 \\ (q^2 > \chi^2_{n(f),\alpha}) & H' \end{array} \tag{3.29}$$

döntés a q^2 valószinüségi változó centrális voltának vizsgálatára <u>egyenletesen legerősebb</u> /most powerful/. Mivel pedig q^2 akkor centrális χ^2 eloszlású, ha a mérési hibák $\tilde{\Theta}$ várható érték vektora 0 abszolut értékü, vagyis 0-val egyenlő, ez egyuttal a $\tilde{\Theta} = 0$ hipotézisre is egyenletesen legerősebb. Ez azt jelenti, hogy az elsőfaju hiba* valószinüségét adott szinten rögzitve a másodfaju hiba** valószinüsége az összes lehetséges vizsgálatokkal elérhetők között minimális, akármennyi is a $\tilde{\Theta} \neq 0$ várható érték vektor abszolut értéke.

---

* Elsőfaju hiba: H_0 valójában fennáll, mégis elvetjük.

** Másodfaju hiba: valójában H' áll fenn, H_0-t mégis elfogadjuk.

Ugyancsak az F.8 függelék mutatja ki, hogy a (3.29) szerinti döntés megengedett a $\tilde{\Theta}$ vektor 0 voltának ellenőrzésére.

3.2.3.2

A mérések elfogadhatóságának vizsgálata a gyakorlatban tehát az alábbiak szerint végezhető:

A (3.25) összefüggést az eredeti együttható és változórendszerre visszatranszformált alakjában használjuk. (3.17)-et felhasználva

$$q^2 = \tilde{f}'(AV_{\tilde{d}}A')^{-1}\tilde{f} \quad . \qquad (3.3o)$$

q^2 tehát (3.11) szerint $\tilde{f}$-ből képzett olyan kvadratikus alak, amelynek együtthatómátrixa a mért értékektől független és igy állandó, előre kiszámitható és az ellenőrzés során csak az aktuális $\tilde{f}$-mal való szorzások végrehajtása szükséges. A mérés elfogadhatatlanságára vonatkozó döntést q^2-nek egy előre meghatározott szignifikanciaszinthez tartozó kritikus q^2_{krit} értékkel való összehasonlitása alapján hozzuk: ha q^2 ennél nem nagyobb, a mérést elfogadjuk, ha nagyobb, elvetjük. Ez utóbbi esetben a mérési eredmények $\tilde{\xi}$ vektorát rendkivüli hibával terheltnek minősitjük.

Az elfogadhatóság vizsgálatának elvét a 3.2.4 pontban szemléltető ábrán is bemutatjuk.

3.2.4 A mért értékek korrekciója

3.2.4.1

Ha a 3.1 részfejezetben felsorolt feltételek fennállnak, beleértve a mérési hibák 0 várható értékét, mód van arra, hogy a rendelkezésünkre álló kiegészitő információkat felhasználva az összetartozó mérési eredményeket korrigáljuk. /Kiegészitő információn a mérlegegyenleteket és a mérési hibák eloszlásának valamint varianciamátrixának ismeretét értjük./ Mint azt már a fejezet bevezetésében jeleztük, azt a kérdést tesszük fel, hogy mi a rendszer legvalószinübb állapota a mérési eredmények és a kiegészitő információk ismerete alapján. Ennek a kérdésnek a megválaszolását a matematikai statisztikában legnagyobb valószinüségü /ML, angolul maximum likelihood/ becslésnek nevezik. A becslés elvi alapjaival kapcsolatban ismét Rao könyvére utalunk [33].

A ML becslés szempontjából esetünkben alapvető az a tény, hogy bármilyen valóságos állapotnak ki kell elégitenie a mérlegegyenleteket, az azokat ki nem elégitő állapotok valószinüsége zérus, igy azok eleve kizártak a ML becslés szempontjából. Következésképpen a ML állapotnak ki kell elégitenie a mérlegegyenleteket. Normáltan ez a feltétel

$$G\hat{\xi}-h = 0 \qquad (3.31)$$

alaku. Keressük tehát az ezen feltételnek eleget tevő legvalószinübb $\hat{\xi}$ vektort az összetartozó mérési eredmények $\tilde{\xi}$ vektorának ismeretében

(3.22) szerint $\tilde{\delta}$ 0 várható értékü, komponensenként független egységszórásu valószinüségi vektorváltozó. Sürüségfüggvénye tehát

$$f_{\tilde{\delta}}(\delta) = D_{n(x)} \cdot exp(-\frac{1}{2}\delta'\delta) \quad , \qquad (3.32)$$

amiből

$$f_{\tilde{\xi}}(\xi) = D_{n(x)} \cdot exp(-\frac{1}{2}(\xi-\check{\xi})'(\xi-\check{\xi})) \quad . \qquad (3.33)$$

/A sürüségfüggvényben

$$D_{n(x)} = (2\pi)^{-\frac{n(x)}{2}} \quad .$$

csak a dimenziószámtól függő állandó./

A ML becslés elvének megfelelően helyettesitsük a mért $\tilde{\xi}$ vektort a sürüségfüggvény ξ változója helyébe és keressük $\check{\xi}$-nek azt a $\hat{\xi}$ becslését, amit $\check{\xi}$ helyébe helyettesitve az igy nyert un. likelihood függvény értéke - esetünkben a (3.31) feltételt is kielégitve - maximális*. Ha a likelihood függvényt $L_{\xi}(\tilde{\xi})$-vel jelöljük, akkor

$$L_{\tilde{\xi}}(\xi) = D_{n(x)} \cdot exp\left(- \frac{1}{2}(\tilde{\xi}-\xi)'(\tilde{\xi}-\xi)\right) \quad . \qquad (3.34)$$

Felhasználva, hogy

$$\tilde{\xi}-\xi = -\gamma \quad ,$$

a korrekcióra az

$$L(\gamma) = D_{n(x)} \cdot exp\left(- \frac{1}{2}\gamma'\gamma\right) \qquad (3.35)$$

likelihood függvényt nyerjük. Ennek maximumhelye nyilvánvalóan azonos az exponenciális függvény argumentuma negáltjának, vagyis mivel $D_{n(x)}$ γ-tól független, a

$$\Psi(\gamma) = \frac{1}{2}\gamma'\gamma \qquad (3.36)$$

függvénynek minimumhelyével. /Ez a megállapitás nyilvánvalóan mind a szabad, mind a feltételes minimumhelyre igaz./

A feltételes minimumhely megállapitásához fejezzük ki a (3.31) feltételt $\hat{\gamma}$-vel. Felhasználva a

$$\hat{\xi} = \tilde{\xi}-\hat{\gamma}$$

összefüggést, a feltételt

---

*Gyakran az igy definiált függvény logaritmusát nevezik likelihood függvénynek. A transzformáció monoton volta miatt a kétféleképpen definiált függvény szélsőérték helyei azonosak.

$$G\hat{\gamma}+\tilde{\varphi} = 0 \qquad (3.37)$$

alakban nyerjük.

A (3.36) célfüggvényből és (3.37) feltételi egyenletből álló feltételes minimum feladatot az F.9 függelékben a Lagrange multiplikátorok módszerével oldottam meg. Végeredményként a feltételes minimum helyére

$$\hat{\gamma} = -G'\tilde{\varphi} \qquad (3.38)$$

adódik. Ez felel meg a keresett normált korrekció ML becslésének. /Itt és a továbbiakban a ^ jellel az optimálisan becsült mennyiséget jelöljük./

A (3.38) összefüggésből kiindulva meghatározhatjuk a normált mérlegváltozó, a maradék becslési hiba és a korrekció számitási képleteit és statisztikai tulajdonságait. Ezeket, felsorolásuk helyett a jobb áttekinthetőség érdekében a 3.2 táblázatban foglaljuk össze. Ez a fejlécben szereplő változókra vonatkozóan a következőket tünteti fel soronként:

- a változónak a valódi mérési hibától való függését. /Ezek az összefüggések csak a továbbiak kiszámitására szolgálnak; közvetlenül számitásra nem használhatók, mert a hiba valódi értékét nem ismerjük./
- a változónak a mért értékek vektorából, vagy az abból számitható mérleghiba vektorból való kiszámitására szolgáló képletet. /A becslés maradék hibája természetesen ezekből az adatokból nem számitható ki./
- a változó várható értékét.
- a változó varianciamátrixát.
- a változó vektor abszolut érték négyzetének várható értékét /azaz második nem centrális momentumát/, mint a becslés maradék hibájának, ill a korrekciónak a legegyszerübben számitható skaláris mértékszámát. /Ennek a

a változó	ω	$\hat{\xi}$	$\hat{\delta}$	$\hat{\gamma}$
függés a valódi értéktől és a mérési hibától	$\omega = f(\tilde{\delta},\check{\xi})$	$\check{\xi}+(I-G'G)\tilde{\delta}$	$(I-G'G)\tilde{\delta}$	$-G'G\tilde{\delta}$
függés a mért értéktől és a mérleghibától	$\omega = f(\tilde{\varphi},\tilde{\xi})$	$\tilde{\xi}-G'\tilde{\varphi}$	nem egyértelmü	$-G'\tilde{\varphi}$
várható érték	$E(\omega)$	$\check{\xi}$	0	0
varianciamátrix	$V_{\omega} = E((\omega-E(\omega))(\omega-E(\omega))')$	$I-G'G$	$I-G'G$	$G'G$
abszolut érték négyzet v.é.	$E(\omega'\omega)$	nincsen értelme	$n(x)-n(f)$	$n(f)$

3.2 táblázat

A normált mérlegváltozó, a maradék hiba és a korrekció vektor becslése és statisztikai tulajdonságai mennyiségnek a becsült normált mérlegváltozó esetében nincs értelme, ezért ott ezt a táblázatban nem szerepeltetjük./

Az összefüggések levezetését az F.9 függelékben közöljük.

Megjegyzendő, hogy mind $V_{\hat{\gamma}}$ mind $V_{\hat{\delta}}$ szinguláris, és ebből következően a $\hat{\gamma}$ és $\hat{\delta}$ valószinüségi vektorváltozók is szinguláris eloszlásuak a mérési hibák $n(d) = n(x)$ dimenziós terében. Ez azt jelenti, hogy mindkét változó a hibák terének csak egy-egy alterében vesz fel értéket: $\hat{\gamma}$ a G mátrix sorai által kifeszitett $n(f)$ dimenziós, $\hat{\delta}$ pedig az azokra ortogonális komplementer $n(x)-n(f)$ dimenziós altérben. Ezekben az alterekben viszont mindkettő megtartja normális, komponensenként független, egységszórásu eloszlását.

A $\hat{\gamma}$ korrekció és $\hat{\delta}$ maradék becslési hiba egymásra ortogonális, minthogy egymásra ortogonális altérbeli vektorok. A korrekció és a maradék becslési hiba vektorok elemenként is korrelálatlanok:

$$C(\hat{\gamma},\hat{\delta}) = E((\hat{\gamma}-E(\hat{\gamma}))(\hat{\delta}-E(\hat{\delta}))') = 0 \tag{3.39}$$

Ennek a ténynek fontos következménye az, hogy az észlelt mérlegeltérésből a maradék becslési hiba mértékére következtetést levonni nem lehet.

3.2.4.2

Mint már emlitettük, az összefüggések és változók normált alakjai numerikus számitásokhoz célszerütlenek a bennük szereplő mátrix négyzetgyökök miatt. A levezetett összefüggések többségében a gyökképzési müvelet végrehajtására nincs szükség, ha a normált változókat visszatranszformáljuk eredeti technológiai /vagyis nem normált/ mérlegváltozókká a (3.12)-(3.19) összefüggések felhasználásával.

A megfelelő összefüggéseket a 3.3 táblázatban adjuk, a 3.2 táblázattal azonos elrendezésben.

A normálatlan korrekció és maradék becslési hiba abszolut értéke mértékegységekre nem invariáns mennyiség, igy négyzetének alkalmazása a becslés minőségének jellemzésére nem ésszerü, ezért azt a táblázatban nem közöljük.

3.2.4.3

A becslés tulajdonságai:

a/ A becslés, mint az közvetlenül belátható, torzitatlan:

$$E(\hat{\xi}) = E(\tilde{\xi})-G'E(\tilde{\varphi}) = \check{\xi} \qquad (3.4o)$$

b/ A becslés minimális varianciáju, Mint ismeretes [33,232. oldal], O v.é. normális eloszlásu hibák esetén a ML becslés egyuttal minimális varianciáju is.

3.2.4.4

A becslés geometriai értelmezése:

Az elfogadhatóság és a hibakiegyenlités elve geometriailag is értelmezhető a mérlegváltozók $n(\mathbf{x})$ dimenziós terében. Az ezzel kapcsolatos fogalmakat a 3.1 ábrán mutatjuk be, a sikbeli ábrázolhatóság érdekében a lehető legegyszerübb $n(\mathbf{x}) = 2$, $n(\mathbf{f}) = 1$ esetre.

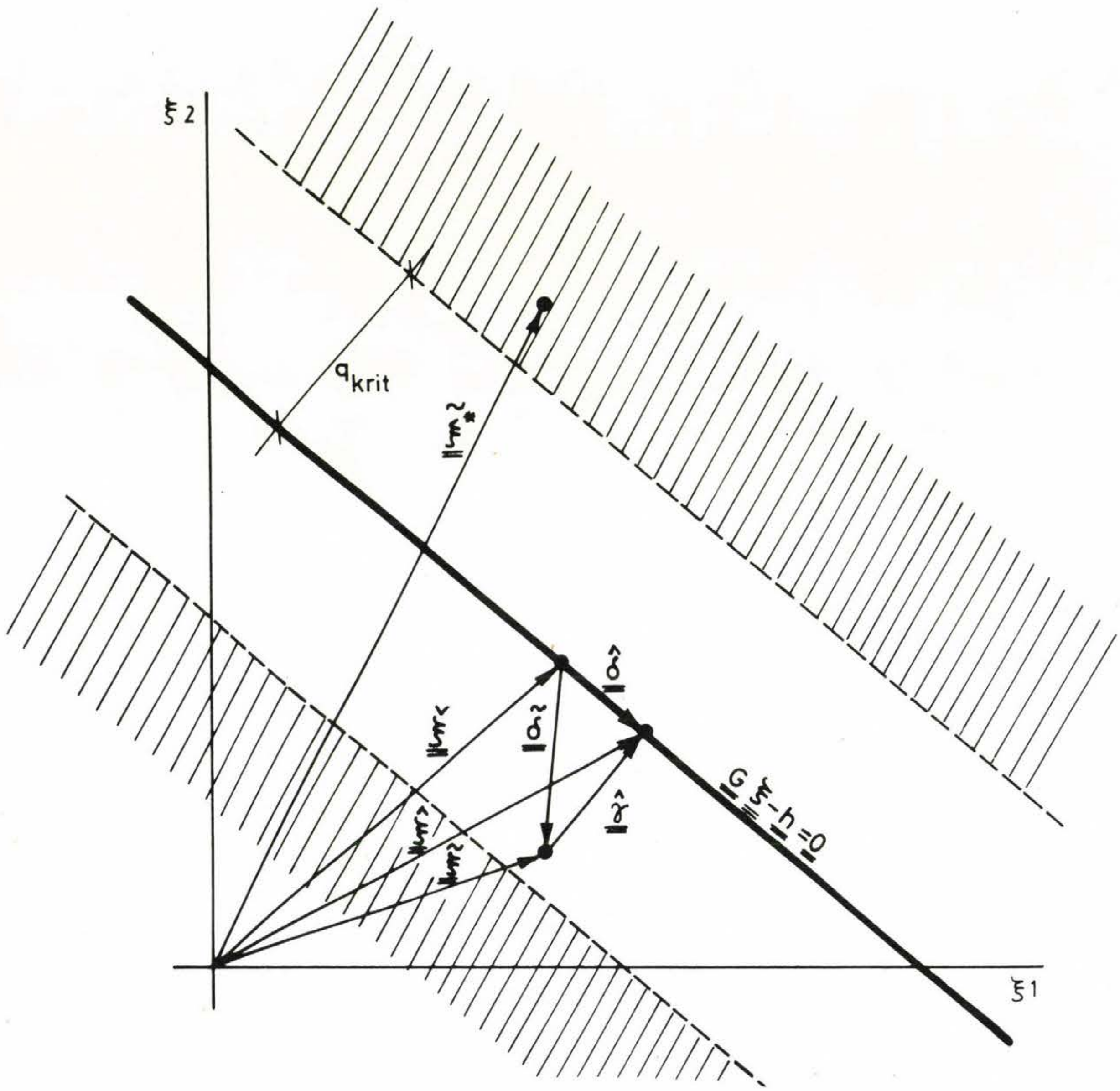
Az ábrán a mérlegváltozók "terét" a ξ_1 és ξ_2 koordinátatengelyek által kifeszitett sik /a papir sikja/ jelenti. A mérlegegyenleteket kielégitő normált mérlegváltozók $\mathbf{G}\xi-\mathbf{h} = 0$ által definiált "lineáris alakzata" esetünkben a folytonos vonallal kihuzott egyenes. Egy ξ_1-ből és ξ_2-ből álló összetett mérést akkor minősitünk a

$$q^2 = \tilde{\varphi}'\tilde{\varphi} \leq q^2_{\mathbf{krit}}$$

a változó	ω	$\hat{x}$	$\hat{d}$	$\hat{c}$
függés a valódi értéktől és a mérési hibától	$\omega = f(\check{x},\tilde{d})$	$\check{x}+(I-V_{\tilde{d}}A'(AV_{\tilde{d}}A')^{-1}A)\tilde{d}$	$(I-V_{\tilde{d}}A'(AV_{\tilde{d}}A')^{-1}A)\tilde{d}$	$V_{\tilde{d}}A'(AV_{\tilde{d}}A')^{-1}A\tilde{d}$
függés a mérés utján meghatározható mennyiségektől	$\omega = f(\tilde{x})$, $\omega = f(\tilde{f})$	$(I-V_{\tilde{d}}A'(AV_{\tilde{d}}A')^{-1}A)\tilde{x}+$ $+V_{\tilde{d}}A'(AV_{\tilde{d}}A')^{-1}b$	nem számitható	$V_{\tilde{d}}A'(AV_{\tilde{d}}A')^{-1}\tilde{f}$
várható érték	$E(\omega)$	$\check{x}$	0	0
variancia-mátrix	$V_{\omega} =$ $= E((\omega-E(\omega))(\omega-E(\omega))')$	$V_{\tilde{d}}-V_{\tilde{d}}A'(AV_{\tilde{d}}A')^{-1}AV_{\tilde{d}}$	$V_{\tilde{d}}-V_{\tilde{d}}A'(AV_{\tilde{d}}A')^{-1}AV_{\tilde{d}}$	$V_{\tilde{d}}A'(AV_{\tilde{d}}A')^{-1}AV_{\tilde{d}}$

3.3 táblázat

A mérlegváltozó, a maradék hiba és a korrekció vektor becslése és statisztikai tulajdonságai



3.1 ábra

Az elfogadhatóság vizsgálat és a hibakiegyenlítés elvének szemléltetése feltétel értelmében elfogadhatónak, ha a méréssel meghatározott $\tilde{\xi}$ pont az egyenes körüli $\pm q_{krit}$ szélességü elfogadhatósági sávon belül van. Az elvetendő mérések tartományát vonalkázással jelöltük. Az ábrán ξ^*-gal jelölt pontnak megfelelő mérési eredmény tehát elfogadhatatlan.

A mérési hibák kiegyenlitése a (3.38) összefüggés értelmében vetités: a mérést jelképező $\tilde{\xi}$ pontot merőlegesen a lehetséges ξ értékek alakzatára /esetünkben egyenesére/ vetitjük. A $\hat{\xi}$ becslés az egyenes $\tilde{\xi}$-hoz legközelebbi pontja. A kettő különbsége a $\hat{\gamma}$ korrekció vektor. A mért ξ_1 és ξ_2 változók /ismeretlen/ valódi értékei természetesen szintén kielégitik a feltételi egyenletet, $\check{\xi}$ szintén az egyenesen helyezkedik el. A valódi és mért mennyiségek $\check{\xi}-\tilde{\xi}$ különbsége a $\tilde{\delta}$ mérési hibavektor; a valódi és a becsült értékek $\hat{\delta}$ különbsége és a $\hat{\gamma}$ korrekciók egymásra merőlegesek és a $\tilde{\delta}$ mérési hibával, mint átfogóval derékszögü háromszöget képeznek. Igy szemléletesen is világos, hogy a becslés maradék hibájának abszolut értéke az eredeti mérési hibánál mindig kisebb.

A transzformálatlan változók hasonlóképpen volnának ábrázolhatók, de abban az esetben a vetités a hiba varianciamátrix I-től való különbözősége miatt általában nem merőleges. Emiatt az ábra nehezebben megszerkeszthető és kevésbé szemléletes volna.

Három változó esetében a hibaellenőrzés és -kiegyenlités még a térben elképzelhető: egy mérlegegyenlet esetén a lehetséges értékek alakzata sik, két egyenlet esetén egyenes. Az elfogadhatóság ellenőrzése az ezektől való távolság alapján történik, a hibakiegyenlités ezekre való vetités. A leggyakoribb reális feladat azonban 3-nál több dimenziós, igy 3 dimenziós terünkben nem szemléltethető.

3.3 A mérések elfogadhatóságának vizsgálata a mérleghibák empirikus varianciamátrixa alapján

Tételezzük fel, hogy az észlelt mérleghibák sorozatán kivül a mérési hibákról más információval nem rendelkezünk. A mérési hibák varianciamátrixának becsléséhez ez nem elegendő. Nem kizárt, hogy bizonyos olyan kiegészitő feltételek mellett, mint a hibák függetlensége, vagy éppen bizonyos hibák korreláltságának mértéke, a mérési hibák varianciamátrixa is becsülhető volna, ennek a feladatnak a megoldását azonban a matematikai szakirodalomból nem ismerjük és az értekezés keretein belül az ezzel kapcsolatos matematikai problémák megoldására nem vállalkoztunk. Értekezésünkben ezért a mérési hibák empirikus varianciamátrix alapján történő kiegyenlitésével nem foglalkozunk. Ezzel szemben a mérések elfogadhatóságának ellenőrzéséhez a (3.3o) összefüggés szerint a mérleghibák varianciamátrixának ismerete is elegendő, ami viszont könnyüszerrel becsülhető a mérések alapján. A következőkben ezt tárgyaljuk részletesebben.

Jelöljük indexszel az adott időpontra vonatkozó megfigyeléseket, ill. az azokból számitott mennyiségeket, igy a t időpontbeli mérésekből számitott mérleghiba vektort $\tilde{f}_t$-mal.

Tekintsük a megfigyelési időpontok egy ekvidisztáns, végeselemü halmazát. Jelöljük ezt a halmazt T-vel, a halmaz elemeinek számát $n(T)$-vel, utolsó elemét tn-nel:

$$T = \{t1, t2, \ldots, tn\} \quad .$$

A T halmaz elemeihez, mint időpontokhoz rendelt megfigyelések, ill. az azokból számitott mennyiségek összességét jelöljük T indexszel. Igy a mérleghiba vektorok összességéből képzett mátrix legyen

$$F_T = (\tilde{f}_{t1}, \tilde{f}_{t2}, \ldots \tilde{f}_{tn}) \quad .$$

Jelöljük F_T saját transzponáltjával képzett szorzatát U_T-vel:

$$U_T = F_T F_T' \quad . \tag{3.41}$$

Ha érvényesek a mérési hibákra kimondott 3.1.2 pontbeli feltételezések, és ha a T időpont halmaz egyes t1,t2,... ...,tn időpontjaihoz tartozó mérési hibák, mint sztochasztikus vektorváltozók statisztikusan függetlenek, akkor U_T $n(f)$ dimenziós $n(T)$ szabadsági foku Wishart eloszlásu mátrix /az ezzel és a továbbiakkal kapcsolatos részleteket illetően lásd Rao könyvének [33] 8.fejezetét/. Ha a mérési hibák 0 várható értéküek, akkor ez az eloszlás centrális, a

$$V_{\tilde{f}} = A V_{\tilde{d}} A' \tag{3.42}$$

paraméterrel. Az idézett könyv jelölésével

$$U_T \sim W_{n(f)}(n(T), V_{\tilde{f}}) \quad .$$

U_T inverzének egy független, szintén $n(f)$ dimenziós, $V_{\tilde{f}}$ varianciáju, 0 v.é. normális eloszlásu vektorváltozóval képzett kvadratikus alakja az $n(T)$ szabadsági fokkal megszorozva Hotelling-féle általánositott T^2 eloszlást mutat:

$$T^2 = n(T) \cdot \tilde{f}_t' U_T^{-1} \tilde{f}_t \quad . \tag{3.43}$$

Bebizonyitható, hogy

$$\frac{k-p+1}{p \cdot k} \cdot T^2 \sim F(k, k-p+1) \quad ,$$

ahol $F(.,.)$ a Fisher-féle F eloszlás, p a vektorváltozó dimenziószáma, és k a Wishart eloszlás szabadsági foka.

Az adott halmazhoz tartozó mérési adatokból a (3.41) és a (3.43) összefüggés szerint legyen

$$\tau^2_{t,T} = \left(\frac{n(T)+1}{n(f)} - 1\right) \cdot \tilde{f}_t' U_T^{-1} \tilde{f}_t \quad . \tag{3.44}$$

Az igy képzett $\tau^2_{t,T}$ valószinüségi változó a fentiek értelmében F eloszlásu. A $k = n(T)$ és $p = n(f)$ paraméterekkel

$$\tau^2_{t,T} \sim F(n(T), n(T)-n(f)-1) \quad .$$

Minthogy az F eloszlás csak 0-nál nagyobb paraméterekre és ezzel összhangban a Wishart eloszlás csak $n(T) > n(f)$-re van értelmezve, a fenti állitás csak ilyen feltétel mellett érvényes. Ugyanez az egyenlőtlenség annak is szükséges feltétele, hogy $F_T F_T'$-nek inverze lehessen. /Ha az inverz ennek ellenére sem létezik, akkor a mérleghibák között 1 valószinüséggel determinisztikus kapcsolat áll fenn./

A $\tau^2_{t,T}$ változó a szokásos hipotézisvizsgálatnak megfelelően alkalmas a mérések elfogadhatóságának ellenőrzésére. Ehhez előzetes adatgyüjtés alapján meghatározzuk az U_T^{-1} mátrixot. Ennek ismeretében az adott t időpontra vonatkozó $\tilde{f}_t$ mérleghiba vektorral képezzük (3.44) szerint a $\tau^2_{t,T}$ mennyiséget. Ezt összehasonlitjuk egy kiválasztott szignifikancia szinthez tartozó F_{krit} értékkel. Ha $\tau^2_{t,T}$ ennél kisebb, a mérések összességét elfogadjuk, ha nagyobb, elvetjük. Ez utóbbi esetben ui. nagy valószinüséggel a mérlegváltozók közül legalább az egyik rendkivüli mérési hibával van terhelve.

Megjegyezzük, hogy ha $n(T) \to \infty$, akkor

$$n(T) \cdot U_T^{-1} \to V_{\tilde{f}}^{-1} \quad ,$$

a vizsgálat pedig az előző részfejezetben tárgyalt χ^2 eloszláson alapulóba megy át. Az itt tárgyalt eljárásnak mégis azért van gyakorlati jelentősége, mert előfordulhatnak olyan rendszerek, ahol nincsen mód arra, hogy $V_{\tilde{f}}$ becsléséhez kellően nagyszámu rendkivüli hibától mentes, tehát az összes feltevést kielégitő megfigyelést lehessen végezni.

Célszerünek igérkezne az ismert összefüggésekre alapozva szekvenciális hibaellenőrzési algoritmust kidolgozni. Ilyen módszeren azt értjük, hogy a *T* halmazt minden megfigyelés után kibővitjük az utolsó vizsgálat időpontjával és a következő vizsgálatot az igy felujitott U_T mátrix alapján végezzük. Ez a megoldás lehetővé tenné a vizsgálat elkezdését viszonylag kis számu megfigyelés elvégzése után ugy, hogy annak megbizhatósága a megfigyelések számának növekedtével egyre inkább megközelitené a valódi varianciamátrix alapján lehetségest. Ez a szekvenciális vizsgálat azonban a jelenleg rendelkezésünkre álló elméleti eszközökkel nem valósitható meg. Ha ui. feltételezzük, hogy némely megfigyelés nem tartozik a "megengedett"-nek tekintett eloszlásba, pl. amiatt, hogy várható értéke nem 0,akkor ezeket nem volna szabad a *T* halmazba sorolni, vagyis U_T meghatározásához felhasználni. Ezek egyértelmü kiszürése azonban nem lehetséges. Könnyen belátható, hogy ha a vizsgálat által elvetett megfigyeléseket nem vesszük figyelembe U_T képzésénél, akkor az eredeti eloszlást csonkitjuk, igy az egyre szigorubbá válik, ami még több megfigyelés elvetéséhez vezet, sit. Ha viszont az elvetésre javasolt méréseket is felhasználjuk, akkor megforditva, a vizsgálat egyre "elnézőbbé" válik. Stabilis szekvenciális vizsgálati módszer tehát a két ut egyikén sem érhető el. /A kérdéskör több szakértőjének véleménye szerint az igy megfogalmazott feladat skaláris változó esetére sincsen megoldva./

3.4 Véletlen és módszeres hibák megkülönböztetése

A megfigyelések egy sorozata lehetőséget ad a "véletlen" és "módszeres" megfigyelési hibák megkülönböztetésére is. /Itt véletlen hibán a 0 v.é. autokorrelálatlan és gyengén autokorrelált, módszeres hibán az állandó, és az erősen autokorrelált hiba összegét értjük./

A megkülönböztetés egymást követő megfigyelésekből számitott mérleghiba vektorok vizsgálatával történhet. Minél több megfigyelésből számitott átlagos mérleghiba vektorral végezzük akár az ismert varianciamátrixon alapuló (3.3o) szerinti, akár az előző részfejezetben ismertetett előzetes megfigyeléshalmazon alapuló (3.44) szerinti vizsgálatot, annál kisebb sullyal fognak az autokorrelálatlan véletlen hibák szerepelni az állandó módszeres hibából adódó mérleghiba mellett. Ha tehát az ismert varianciáju 0 v.é. normális eloszlásu hiba - mint nullhipotézis - mellett ellenhipotézisünket, azaz azt, hogy a v.é. 0-tól különbözik, még kiegészitjük azzal is, hogy ez a v.é. állandó, növelhetjük a vizsgálat megbizhatóságát, ha az egy adott t időpontra értelmezett $\tilde{f}_t$ mérleghibavektor helyett egy T időpont halmazra értelmezett $\bar{f}_T$ átlagos mérleghiba vektorral számolunk. Azt kell csupán figyelembe vennünk, hogy autokorrelálatlan hibák esetében az átlag varianciája a figyelembe vett észlelések számának arányában csökken. Tehát az

$$\bar{f}_T = F_T \, l \cdot \frac{1}{n(T)} \tag{3.45}$$

átlagos mérleghiba vektor varianciamátrixa ebben az esetben

$$V_{\bar{f},T} = \frac{1}{n(T)} \cdot V_{\tilde{f}} \tag{3.46}$$

Ennek megfelelően a módszeres hiba ellenőrzését a varianciamátrix ismeretében a χ^2 eloszlásu

$$q^2 = n(T) \cdot \bar{f}_T' \cdot V_{\tilde{f}}^{-1} \cdot \bar{f}_T \tag{3.47}$$

mennyiségre célszerü alapozni a 3.2 részfejezetben leirt elméleti megfontolásoknak megfelelően, ahhoz hasonló módon.

Ugyanezt a vizsgálatot az előzetesen észlelt, módszeres hibamentes /!/ mérleghiba adatokra alapozva is el lehet végezni. Mivel azonban a Hotelling-féle általánositott T^2 eloszlás statisztikailag független $\tilde{f}_t$ és U_T változók esetében áll fenn, fontos, hogy az az időpont halmaz, ami alapján U-t, és az, amely alapján $\bar{f}$-et számitjuk, különböző és diszjunkt legyen. Az első időponthalmazt $T1$-gyel, az utóbbit $T2$-vel jelölve, tehát ha

$$T1 \cap T2 = \emptyset \quad ,$$

akkor a 3.3 részfejezetben vizsgáltak értelmében az ottani (3.44) összefüggéssel meghatározott $\tau^2_{t,T}$ valószinüségi változó helyett a

$$\tau^2_{T1,T2} = n(T2)\left(\frac{n(T1)+1}{n(f)}-1\right)\bar{f}'_{T2}U^{-1}_{T1}f_{T2} \qquad (3.48)$$

változó alkalmas a mérési hibák vizsgálatára. $\tau^2_{T1,T2}$ szintén F eloszlásu:

$$\tau^2_{T1,T2} \sim F(n(T1),n(T1)-n(f)-1) \quad .$$

Ha ui. a hibák eloszlására tett feltételezéseink - a különböző időpontbeli hibák autokorrelálatlan voltát is beleértve - fennállnak, akkor az eloszlást nem befolyásolja, hogy a mérleghiba vektor helyett az átlagot vizsgáljuk, mert 0 v.é. normális eloszlásu vektorváltozók átlaga szintén 0 v.é. és normális eloszlásu. Csupán a variancia változik meg, ennek következménye (3.48)-ban az $n(T2)$ szorzófaktor.

A módszeres hibák ellenőrzésének gyakorlati megvalósitása a (3.47) vagy (3.48) összefüggés felhasználásával nyilvánvaló.

4 MÉRLEGEGYENLETEKET KIELÉGITŐ KÖZELITŐ STATIKUS MATEMATIKAI MODELLEK

Vegyipari rendszerek modellezése során gyakran használunk közelitő modelleket, elsősorban akkor, ha a számitás gyorsitása és egyszerüsitése érdekében korlátozott pontossággal, vagy szükebb érvényességi tartománnyal is megelégszünk.

Ha egy többkimenetü rendszer kimeneteit közelitő összefüggésekkel számitjuk, akkor az összefüggések pontatlansága miatt a számitott értékek többé vagy kevésbé ellentmondásba kerülhetnek az olyan általános érvényü megmaradási törvényekkel, mint a kémiai elemek vagy az energia megmaradása. Ez pedig nemcsak azért baj, mert /joggal/ megingatja a felhasználónak a modell érvényességébe vetett bizalmát, hanem - különösen recirkulációt tartalmazó rendszerek számitása során a hibák halmozódásának lehetősége miatt is - elfogadhatatlan eredményekre vezethet. Élesen jelentkezhet ez a probléma, ha a számitott adatokat mérlegekhez, vagy üzemek közötti elszámolásra akarjuk felhasználni. Mindezeket a hibákat mérleghelyes matematikai modellek alkalmazásával el lehet kerülni.

A probléma általánosan alkalmazott, triviális megoldása, hogy csak annyi közelitő összefüggést használunk az adott müveleti egység matematikai modellejében, amennyi a független ismeretlen változók száma, a fennmaradókat pedig a megmaradási egyenletekből határozzuk meg. Kérdéses azonban ebben az esetben, hogy mi a teendő, ha a független egyenleteknél nagyobb számu kimenő változót mértünk: hogyan hasznositsuk ezt a többlet információt ugy, hogy a végeredményül kapott modell összhangban legyen a megmaradási törvényekkel.

Kézenfekvő, hogy most is, mint általában, a legkisebb négyzetek /LKN/ elvét alkalmazzuk az összefüggések együtthatóinak becsléséhez, de olyan kiegészitő feltételekkel, hogy a végeredményként adódó összefüggések bármilyen független változó értékkel kielégitsék a megmaradási egyenleteket. Csak a lineáris és az együtthatókban lineáris modellek és lineáris feltételi egyenletek esetét tárgyaljuk. Ezekben az esetekben a közelitő összefüggés együtthatóinak meghatározása elemi lineáris algebrai módszerekkel történhet. Az ezektől eltérő problémák explicit megoldására - ha megoldás egyáltalán létezik - aligha van remény. Ilyenkor valamilyen numerikus módszer alkalmazása lehet célravezető.

A LKN elvének alkalmazásakor természetesen tudatában kell lennünk annak, hogy a kapott modelltől nem várhatunk matematikai-statisztikai értelemben korrekt becslést /torzitatlan, konzisztens, stb./, minthogy itt ezt a technikát nemcsak a megfigyelési hibák kiegyenlitésére, hanem azzal egyidejüleg függvényapproximációra is felhasználjuk. Ennek megfelelően a továbbiakban megfigyelési hibán is valójában a mérési hiba és a modell struktura hiba összege értendő.

Ebben a fejezetben csak a rendszerek állandósult állapotát leiró, statikus modelljeivel foglalkozunk. Ugyanezt dinamikus modellekkel kapcsolatosan az 5. fejezetben tárgyaljuk.

4.1 Lineáris modellek és feltételi egyenletek

Jelöljük **u**-val a független, **y**-nal a függő változók $n(u)$, ill. $n(y)$ elemü vektorait és legyen a rendszer statikus matematikai modelljében feltételezett függvénykapcsolat

$$\mathbf{y} = \mathbf{B}\mathbf{u}+\mathbf{b} \qquad (4.1)$$

alaku, ahol **B** $n(y)\cdot n(u)$ méretü együttható mátrix és **b** $n(y)$ elemü vektor a rendszerre jellemző állandók. Ugyanakkor megköveteljük, hogy a (4.1) szerint összefüggő változók tetszőleges **u**-val kielégitsék az $n(h)$ számu mérlegegyenletnek megfelelő

$$Hu+Gy+h = 0 \tag{4.2}$$

feltételrendszert, ahol H $n(h)\cdot n(u)$, G $n(h)\cdot n(y)$ méretü együtthatómátrixok, h pedig a mérlegyenletek esetleges állandó tagja.

Megjegyzendő, hogy a független mérlegegyenletek száma okvetlenül kisebb a függő változók számánál:

$$n(h) < n(y) \quad .$$

Ellenkező esetben ui. a feladat értelmét veszti: vagy minden függő változó a mérlegekből számitható, vagy már maga a feltételrendszer is ellentmondó. Ugyanakkor feltételezhetjük a (4.2) feltételrendszer minden sorának függetlenségét, ellenkező esetben ui. a nem független sorok minden további következmény nélkül elhagyhatók.

4.1.1 Változók kiküszöbölése

Ha a függő változók közül csak a minimálisan szükséges számut, vagyis a lineárisan függetleneket mérjük, vagy más okokból csak azokat akarjuk a modell együtthatók számitásához felhasználni, akkor a megoldás triviális.

A függő változók **y** vektorát két minorra bontjuk. y_1-gyel jelöljük azt az $n(h)$ számut, amely a többi, y_2-vel jelölt függő változó és az **u** független változók ismeretében a feltételrendszerből kiszámitható. Az általánosságot nem sérti, ha feltételezzük, hogy y_1 valamennyi eleme y-ban megelőzi y_2 valamennyi elemét, tehát ha

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \text{----} \\ y_2 \end{pmatrix} \quad .$$

Ha az elemek nem vonának eleve igy értelmezve, a szükséges átrendezés mindig elvégezhető.

Értelemszerüen bontsuk fel ennek a felbontásnak megfelelően B-t és b-t is sorminorokra, G-t pedig oszlopminorokra:

$$B = \begin{pmatrix} B_1 \\ \hline B_2 \end{pmatrix}, \qquad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \hline b_2 \end{pmatrix}, \quad G = (G_1 \mid G_2) .$$

Ezek után, ha a feltételrendszer **H**, **G** és **h** állandói adottak, elegendő az y_2-nek u-tól való függését leiró

$$y_2 = B_2u+b_2 \tag{4.3}$$

összefüggés együtthatóit meghatározni az u_j és $\tilde{y}_{2,j}$ (j = =1,2,...,m) minták alapján. A többi, y_2-től függő változót u ismeretében a feltételrendszer alapján számithatjuk ki az

$$y_1 = G_1^{-1}(G_2y_2+Hu+h) \tag{4.4}$$

összefüggés alapján.

Ha a teljes **y** vektort a (4.1) összefüggéssel egy lépésben kivánjuk **u**-ból számitani, akkor B_2-ből és b_2-ből **G**, **H** és **h** ismeretében a teljes **B** és **b** együtthatórendszer is meghatározható:

$$B = \begin{pmatrix} -G_1^{-1}H \\ \hline O \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -G_1^{-1}G_2 \\ \hline I \end{pmatrix} B_2 \tag{4.5}$$

és

$$b = \begin{pmatrix} -G_1^{-1}h \\ \hline O \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -G_1^{-1}G_2 \\ \hline I \end{pmatrix} b_2 \tag{4.6}$$

A (4-4)-(4.6) összefüggések levezetését az F.1o függelék tartalmazza.

A számitás programozása szempontjából előnyösebb, ha a (4.5) és (4.6) összefüggésekkel előregyártott együtthatókkal a teljes **y** vektort a (4.1) összefüggéssel egy lépésben számitjuk, mint az, ha y_2-t (4.3)-ból, majd y_1-et (4.4) alapján határozzuk meg. Müveletszám szempontjából ez az előny nem egyértelmü és $n(y)$, $n(u)$, valamint $n(h)$ konkrét értékétől függ, hogy melyik ut előnyösebb.

Megjegyzendő, hogy ha a minimálisan szükségesnél több függő változót mérünk, y_2 elemeinek megválasztása nem egyértelmü, és - mivel a minták általában hibával terheltek - a végeredményül kapott B és b együtthatók ettől a választástól is függnek.

4.1.2 A legkisebb négyzetek elvének alkalmazása

Tekintsük azt az esetet, amikor valamennyi függő változót mérjük és egy-egy megfigyelés egy-egy teljes összetartozó u_j, $\tilde{y}_j$ vektorpárból áll.

Tegyük fel, hogy az u bemenetek és y kimenetek közötti függvénykapcsolat és a feltételrendszer most is a (4.1), ill. (4.2) összefüggés. Az ismeretlen együtthatók becsléséhez az u_j, $\tilde{y}_j$ vektorpárok egy m elemü sokaságával rendelkezünk, ahol a függő változó vektorra vonatkozó $\tilde{y}_j$ megfigyeléseink hibával terheltek.

A megfigyelések általában nem elégitik ki pontosan semmiféle B-vel és b-vel a (4.1) összefüggést, sem pedig a (4.2) feltételrendszert. Célunk az, hogy olyan B, b együtthatókat határozzunk meg, amelyekkel az

$$\hat{y} = \hat{B}u+\hat{b} \tag{4.7}$$

összefüggéssel becsült változókkal a (4.2)-nek megfelelő

$$Hu+G\hat{y}+h = 0 \tag{4.8}$$

feltételrendszer bármilyen u-ra pontosan teljesül és az ezt kielégitők közül a LKN elvének értelmében legjobban illeszkedik a megfigyelt u_j, $\tilde{y}_j$ vektorpárok halmazához.

Definiáljuk ehhez az ε_j illeszkedési hiba vektorokat, mint

$$\varepsilon_j = \tilde{y}_j - \hat{B}u_j - \hat{b} \qquad (4.9)$$

-t.

A LKN közelitést ebben a több függő változós esetben értelemszerüen valamennyi függő változó valamennyi megfigyelésének illeszkedési hiba négyzetösszegének minimalizálásaként értelmezzük. Mivel azonban az **y** vektor elemei erősen különböző nagyságrendüek és más-más nagyságrendü megfigyelési hibával lehetnek terhelve, okvetlenül biztositani kell az illeszkedési hibák sulyozásának lehetőségét. E célból vezessük be az egyes függő változók megfigyelésének /mérőmüszerek/ megbizhatóságát jellemző ν_h reciprok sulyokat, az általánosság kedvéért pedig az egyes megfigyelések /időpontok/ megbizhatóságának jellemzésére a ω_j reciprok sulyokat ugy, hogy a h-adik függő változó j-edik megfigyelésének sulya

$$\frac{1}{\nu_h \cdot \omega_j}$$

legyen. A minimalizálandó sulyozott illeszkedési hiba négyzetösszeg tehát legyen

$$f = \sum_{j=1}^{m} \sum_{h=1}^{n(y)} \left(\frac{\varepsilon_{h.j}}{\nu_h \cdot \omega_j} \right)^2 \qquad (4.1o)$$

Ugyanez mátrix irásmóddal

$$f = Tr(V^{-1/2} E W^{-1} E' V^{-1/2}) \qquad (4.11)$$

ahol **E** az m számu ε_j illeszkedési hiba vektorból, mint oszlopokból képzett mátrix:

$$E = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_j, \ldots, \varepsilon_m) \quad ; \qquad (4.12)$$

V, ill. **W** a v_h, ill. w_j reciprok sulyok négyzeteiből képzett $n(y) \cdot n(y)$ ill. m•m méretü diagonális mátrixok:

$$V = \begin{pmatrix} \nu_1^2 & & & & \\ & \nu_2^2 & & \bigcirc & \\ & & \ddots & & \\ & & & \nu_n^2 & \\ & \bigcirc & & & \ddots \\ & & & & & \nu_n^2 \end{pmatrix},$$

ill.

$$W = \begin{pmatrix} \omega_1^2 & & & & \\ & \omega_2^2 & & \bigcirc & \\ & & \ddots & & \\ & & & \omega_j^2 & \\ & \bigcirc & & & \ddots \\ & & & & & \omega_m^2 \end{pmatrix}.$$

A továbbiakban nem használjuk ki, hogy V és W diagonális. Általánosabb esetben, ha a megfigyelési hibák korreláltak, indokolt lehet általános sulyozó mátrixok választása. Mindenesetre megkivánjuk, hogy mind V, mind W szimmetrikus és határozottan pozitiv definit legyen, tehát létezzék inverze és valós négyzetgyöke. Feladatunk tehát a (4.8) feltételrendszert kielégitő és a (4.11) célfüggvényt minimalizáló feltételes LKN feladat megoldása.

Első lépésként a (4.8) feltételrendszert alakitsuk át ugy, hogy ne tartalmazza a tetszőleges **u** független és a hozzátartozó $\hat{y}$ függő változót. Ez a (4.7) becslő formulának a feltételrendszerbe helyettesitésével valósitható meg. Igy

$$(H+G\hat{B})u+(h+G\hat{b}) = 0 \tag{4.12}$$

és ahhoz, hogy az egyenlőség bármilyen u-val teljesüljön, külön-külön teljesülnie kell a

$$H+G\hat{B} = 0 \tag{4.13}$$

és a

$$h+G\hat{b} = 0 \tag{4.14}$$

feltételeknek. Az igy átalakitott feltételrendszer már csak a mérlegegyenletekből ismert együtthatókat és a becsülni kivánt, egyelőre ismeretlen modellegyütthatókat tartalmazza. A levezetés további részeit az ellenőrzéshez szükséges részletességgel az F.11 függelékben közöljük, itt csak annak gondolatmenetét vázoljuk, helyenként a függelék összefüggéseire hivatkozva.

A megoldás következő lépéseként a homogén feltételes LKN közelités feladatát oldjuk meg, vagyis azt, amikor mind a (4.1), ill. (4.7) modell összefüggésbeli **b**, mind a (4.2) ill. (4.8) feltételrendszerbeli **h** vektor zérus. A (4.11) szerinti f célfüggvény feltételes szélsőértékhelyének meghatározásához a Lagrange multiplikátorok módszerét használjuk. E szerint a multiplikátorral szorzott feltételrendszerrel kibővitett célfüggvénynek képezzük mind az ismeretlen együttható, mind a multiplikátor szerinti parciális deriváltjait /F.11.7-8/. Tekintettel arra,hogy a célfüggvény pozitiv definit és a deriváltakkal képzett egyenletrendszernek egyetlen megoldása van, ez a megoldás a keresett minimumhely. A zérushely kétismeretlenes mátrixegyenlet megoldásával képletszerüen nyerhető /F.11.11/. A kapott összefüggés olyan alakra transzformálható, amiben a feltételrendszert kielégitő együttható a szabad LKN becsléssel kapott együttható és egy korrekciós tag összege. Ez az alak mind az összefüggés értelmezése, mind kiszámitása szempontjából előnyös /F.11.13/.

A homogén feladat megoldásából az inhomogén feladat megoldását ugy kapjuk /F.11.b/pont/, ha a megfigyelések független változó vektorait kiegészitjük egy 1-gyel egyenlő állandó elemmel. A feltételrendszer állandó tagját mint ennek a vektorkomponensnek az együtthatóját tekintjük, megoldásként az állandó tagot pedig mint ennek a komponensnek az együtthatóját nyerjük. /A megfelelő transzformációs képletek a függelékbeli /F.11.31/ összefüggések./ A megoldás numerikusan stabilabbá válik és a megoldandó egyenletrendszer ismeretlenjeinek száma eggyel csökken, ha a szabad LKN közelitésnél gyakran alkalmazott eljáráshoz hasonlóan a megfigyelt független és függő változókat lineárisan ugy transzformáljuk, hogy W^{-1}-gyel sulyozott összegük elemenként 0 legyen. Ez legegyszerübben ugy valósitható meg, hogy az adott változó sulyozott átlagát minden megfigyelt értékből levonjuk. Ennek a transzformációnak az eredményeképpen az együtthatómátrix számitására szolgáló összefüggés két független összefüggésre esik szét /F.11.34—35/. Ha végül ezekbe a sulyozott átlagra transzformált változókat visszahelyettesitjük ugy, hogy a végképletben az eredeti megfigyelések szerepeljenek, az együtthatók számitására az alábbi összefüggéseket nyerjük /F.11. 40—42/.

$$\boxed{\hat{B} = B_f - VG(GVG')^{-1}(GB_f + H)} \qquad (4.15)$$

ahol B_f az együttható szabad LKN közelitése:

$$\boxed{B_f = (\tilde{Y}-\overline{Y})\cdot W^{-1}(U-\overline{U})'((U-\overline{U})W^{-1}(U-\overline{U})')^{-1}} \qquad (4.16)$$

és

$$\boxed{\hat{b} = \overline{y}-\hat{B}\overline{u}-VG'(GVG')^{-1}(h+G\overline{y}+H\overline{u})} \qquad (4.17)$$

ahol U ill. $\tilde{Y}$ az u_j ill. $\tilde{y}_j$ $(j=1,2,\ldots,m)$ vektorokból, mint oszlopokból képzett mátrix, $\overline{u}$ ill. $\overline{y}$ ugyanezen vektorok sulyozott átlagainak vektora, $\overline{U}$ ill. $\overline{Y}$ az azonos $\overline{u}$ ill. $\overline{y}$ vektorokból, mint oszlopokból képzett mátrix. /A részleteket illetően lásd a 11.függelék (F.11.25-26) összefüggései előtti összefüggéseket./

Az F.11. függelék c/pontjában végül megmutatjuk, hogy ezeknek az együtthatóknak a felhasználásával a (4.7) összefüggés alapján becsült $\hat{c}$ együttható ill. y függő változó a valódi együttható ill. valódi kimenet torzitatlan becslése, ha a megfigyelési hiba u-tól statisztikusan független és 0 várható értékü, vagyis ha a modell strukturája helyes. A d/ pontban megmutatjuk ezen kivül, hogy a mérlegegyenleteket képviselő (4.8) feltételrendszer figyelembevétele csökkenti a becslési hiba sulyozott varianciáját a szabad LKN becsléssel nyert együtthatók alapján adódó becslési hibához képest. A feltételrendszer figyelembevétele tehát nemcsak a fejezet bevezetőjében tárgyalt szempontok miatt célszerü, hanem a becslés pontossága szempontjából is előnyös.

4.2 Együtthatókban lineáris modellek és lineáris feltételi egyenletek

A nemlineáris modelleknek csak a legegyszerübben tárgyalható, együtthatóiban lineáris tipusával foglalkozunk, tehát az

$$y = B\cdot f(u)+b \tag{4.18}$$

alaku összefüggéssel, ahol $f(u)$-val az u független változó ismeretlen paramétert nem tartalmazó vektor-vektor függvényét jelöljük.

A feltételrendszert ebben az esetben is lineárisnak tekintjük, tehát (4.2)-höz hasonlóan

$$H_u u+Gy+h = 0 \tag{4.19}$$

alakunak. Ez a megszoritás szükséges a következő, viszonylag egyszerü megoldáshoz, ugyanakkor a feladatok egy széles körénél teljesül, ui., mint azt a 2.fejezetben megállapitottuk, a mérlegegyenletek a komponensmennyiségek ill. áramok között kivételes esetektől eltekintve lineáris feltételeket jelentenek.

A (4.18) alakból következik az a megszoritás, hogy valamenynyi függő változó u-tól való függését u-nak azonos nemlineáris függvényeinek különböző sulyokkal vett összegeként állitjuk elő, vagyis hogy a különböző függő változókra a különböző függvénykapcsolatok csak az együtthatók különbözőségéből adódhatnak.

Megkivánjuk hogy $f(u)$ tartalmazza elemei között az u független változó vektor valamennyi elemét is, tehát hogy $f(u)$

$$f(u) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u_{n(u)} \\ g_1(u) \\ g_2(u) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ g_{n(g)}(u) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ \hline g(u) \end{pmatrix}$$

alaku legyen.

Ez az előirás nem jelent különleges igényt a modellel szemben a lineáris tagok ui. a folytonos vektor-vektor függvény Taylor sora elsőfoku tagjainak is tekinthetők. /Nincs okvetlenül szükség egy adott változóban lineáris tagra, ha az nem szerepel a mérlegegyenletben./

Képezzük a (4.19) feltételrendszer H_u együtthatómátrixának O-val való kibővitésével a

$$H = (H_u \mid O)$$

együtthatómátrixot. Ezzel a (4.19) feltétel a

$$Hf(u)+Gy+h = 0$$

alakra hozható. Igy az $f(u) \rightarrow u$ megfeleltetéssel a (4.18) függvényalakkal és a (4.19) feltételrendszerrel meghatározott feladat visszavezethető a 4.1 részfejezetben tárgyaltra.

Megjegyzendő, hogy célszerütlenül választott $g(u)$ függvényalakok esetében az ilymódon transzformált feladat megoldása során rosszul meghatározott /ill conditioned/ egyenletrendszer megoldási /ill. mátrix invertálási/ problémák léphetnek fel. Ez a probléma biztonságosan $f(u)$ elemeinek ortogonális függvényrendszer elemeiből való választásával kerülhető el. Igy egyetlen független változótól való polinomos függés esetén Legendre vagy Csebisev polinomokat alkalmazhatunk. /Többváltozós ortogonális polinomrendszerek generálása feltehetőleg szintén lehetséges, de erre vonatkozó irodalmat nem ismerek. Ennek a kérdésnek részletezését azonban nem tekintem értekezésem feladatának./

Az együtthatóbecslő algoritmus alkalmazásának példájául a 2.melléklet szolgál [5]. Ebben etilénoxidációs kisérleti üzemi reaktor mérési eredményeit közelitjük együtthatóiban lineáris nemlineáris empirikus összefüggéssel ugy, hogy a kapott közelitő képlet kielégitse a rendszerre felállitható mérlegegyenleteket.

5 MÉRLEGEGYENLETEKET KIELÉGITŐ DINAMIKUS MODELLEK

A korszerü irányitáselmélet gyakorlati alkalmazásához szükség van a szóbanforgó rendszer időbeli viselkedését leiró dinamikus modelljére. Mivel azonban a valóságos müszaki folyamatok elméleti alapon nagyon gyakran csak bonyolult,nemlineáris parciális differenciálegyenletek rendszerével irhatók le /"elosztott paraméterü rendszerek"/, irányitási feladatok elemzése és megoldása során a gyakorlati kezelhetőség érdekében közelitő modelleket szokás használni.

Közelitő dinamikus modellhez juthatunk elvi megfontolások alapján a részletesebb modellek egyszerüsitésével, a kevésbé lényeges hatások tudatos elhanyagolásával. Ilyenkor nyilvánvalóan csak olyan elhanyagolásokat szabad tennünk, amelyek nem vezetnek ellentmondásra az alapvető megmaradási törvényeket kifejező mérlegegyenletekkel. Ezt a kérdést itt részleteiben nem tárgyaljuk, mivel a megoldás legtöbbször nyilvánvaló, ellenkező esetben pedig egyedi vizsgálatot igényel.

Ha elvi megfontolásokkal nem tudjuk dinamikus modellünket kellőképpen egyszerüsiteni, vagy ha egyáltalán nem rendelkezünk elméleti modellel, akkor matematikai közelitő módszerekkel, ill. empirikusan készitünk egyszerüsitett modelleket. Az igy kapott modellek szerkezetükben már nem tükrözik a fizikai valóságot, együtthatóik legtöbbször már nem birnak fizikai tartalommal és az ilyen modellek legtöbbször nem elégitik ki szükségszerüen a megmaradási törvényeket sem.

Ebben a fejezetben olyan algoritmust javasolunk, amellyel az egyszerüsitett dinamikus modell együtthatóinak becslése során a mérlegegyenleteket figyelembe lehet venni ugy, hogy a kapott együtthatórendszer összhangban legyen a megmaradási törvényekkel.

Nem tárgyaljuk teljességében a megmaradási törvények és a dinamikus matematikai modellek kapcsolatát. Az egyszerüség kedvéért csupán egy triviálisan belátható szükséges feltételt fogunk megvizsgálni, nevezetesen azt, hogy milyen feltételek mellett elégiti ki egy lineáris diszkrét idejü dinamikus modell állandósult megoldása a megmaradási egyenleteket.

5.1 A dinamikus modell

Tárgyalásunkat a legegyszerübben kezelhető lineáris, diszkrét idejü, közönséges differenciaegyenletekből álló /"koncentrált paraméterü"/ modellekre korlátozzuk. Természetesen csak időinvariáns /állandó együtthatóju/ modellekkel foglalkozunk, mivel időben változó rendszerben állandósult állapot eleve nem lehetséges.

Jelöljük a vizsgált dinamikus modell t időpontbeli bemeneteiből, ill. kimeneteiből képzett vektort $u^*(t)$-vel, ill. $y^*(t)$-vel, bármilyen $\bar{u}^*$ állandó bemenethez tartozó állandósult kimenetet $\bar{y}^*(\bar{u}^*)$-sal, a modell munkapontját u^W ill. y^W-vel. Munkaponton a változók terének egy olyan kiválasztott pontját értjük, ami mint állandósult állapot kielégiti a modellt, és aminek a környezetében az egyszerüsitett modell jó közelitéssel irja le a valóságos rendszert. A munkapontra transzformált mennyiségeket jelölje

$$u(t) = u^*(t)-u^W \quad , \qquad y(t) = y^*(t)-y^W \quad , \tag{5.1}$$

ill. a transzformált állandósult állapotokat

$$\bar{u} = \bar{u}^*-u^W \quad , \qquad \bar{y}(\bar{u}) = \bar{y}^*(\bar{u}^*)-y^W \quad . \tag{5.2}$$

Igy a dinamikus modell az alábbi alakban irható fel:

$$\sum_{i=0}^{p(y)} A_i\, y(t-i\theta)+\sum_{i=0}^{p(u)} B_i u(t-(k+i)\theta) = 0 \quad , \tag{5.3}$$

ahol

i a modellben figyelembe vett előző időpontokra utaló futó egész változó,

θ a mintavételezési időintervallum,

k a holtidő /$k > 0$, egész/,

$p(\cdot)$ a rendszer rendje az argumentumban meghatározott változóra nézve,

$\mathbf{A}_i$ és $\mathbf{B}_i$ az adott rendszerre jellemző együtthatómátrixok.

Az (5.3) összefüggés felhasználható arra, hogy "t"-t ekvidisztáns időpontokban megelőző bizonyos számu $\mathbf{y}$ és $\mathbf{u}$ érték ismeretében $\mathbf{y}(t)$-t kiszámitsuk. Az ezen modellel kapcsolatos részletkérdésekkel /pl. stabilitás/ itt nem foglalkozunk, mivel azokat az irányitáselmélet irodalma részletesen tárgyalja /lásd pl. [8,11]/.

Megjegyezzük, hogy $p(u)$ növelésével mód volna az (5.3) alaku modell olyan transzformációjára, amellyel valamennyi $\mathbf{A}_i$ együttható skalármárixszá alakitható ($\mathbf{A}_i = a_i \cdot \mathbf{I}$). Az egyszerübb tárgyalásmód érdekében ezzel a lehetőséggel nem élünk.

5.2 A mérlegegyenletekből adódó feltételrendszer

A dinamikus modellt ki kell elégitenie minden állandósult megoldásnak, tehát minden összetartozó $\bar{u}$, $\bar{y}(\bar{u})$ vektorpárnak. Minden állandósult állapotban

$$\begin{aligned} u(t-k\theta) &= u(t-(k+1)\theta) = \ldots = \\ &= u(t-(k+p(u))\theta) = \bar{u} \end{aligned} \tag{5.4}$$

és

$$\begin{aligned} y(t) &= y(t-\theta) = y(t-2\theta) = \ldots = \\ &= y(t-p(y)\theta) = \bar{y} \quad , \end{aligned} \tag{5.5}$$

(5.3)-ból következik, hogy az

$$\sum_{i=0}^{p(u)} A_i \bar{y} + \sum_{i=0}^{p(y)} B_i \bar{u} = 0 \tag{5.6}$$

összefüggésnek teljesülnie kell minden összetartozó $\bar{u}$, $\bar{y}$-sal. /Itt és a továbbiakban $\bar{y}(\bar{u})$-t egyszerüség kedvéért $\bar{y}$-sal jelöljük, fenntartva, hogy az egy összefüggésben szereplő $\bar{u}$ és $\bar{y}$ összetartozó, az (5.6) összefüggést kielégitő vektorokat jelent./

Ugyanakkor a fejezet bevezetőjében kitüzött feladat értelmében az összetartozó transzformálatlan változóknak ki kell elégiteniök egy, a mérlegegyenleteknek megfelelő lineáris feltételrendszert is. Ezt a feltételt az alábbiakban kissé általánosabban fogalmazzuk meg, mivel az a tárgyalás során nehézséget nem jelent.

Legyen adva az állandósult transzformálatlan változókra a

$$G_y \bar{y}^* + G_u \bar{u}^* + g = 0 \tag{5.7}$$

$n(g)$ számu sorból álló inhomogén feltételrendszer. Ha ez kizárólag mérlegegyenletekből áll, akkor nyilvánvalóan $n(g) < n(y)$ és a 2. fejezetbeli (2.17) összefüggés szerint

$$V = (G_y \mid G_u)$$

és

$$\Delta v = \begin{pmatrix} \bar{y}^* \\ \hline \bar{u}^* \end{pmatrix}$$

-gal $g = 0$, tehát a feltételrendszer valójában homogén. Nem zárjuk ki azonban azt sem, hogy (5.7) a rendszer /mérlegegyenleteket kielégitő/ statikus lineáris modellje legyen. Ebben az esetben $n(g) = n(y)$ és általában $g \neq 0$. Ha (5.7)-re vonatkozólag az

$$n(g) \leq n(y)$$

feltételt tesszük, g-re pedig mind O-t, mind attól különböző értéket megengedünk, akkor a két, tartalmilag némiképpen különböző feladat formálisan egységesen tárgyalható.

Megköveteljük, hogy a munkapont elégitse ki az (5.7) feltételrendszert, álljon fenn tehát, hogy

$$G_y y^w + G_u u^w + g = 0 \quad . \tag{5.8}$$

A munkapont ilyen megválasztásából és az (5.7) összefüggésből következik, hogy a munkapontra transzformált $\bar{u}$, $\bar{y}$ változópárokra minden esetben a homogén

$$G_y \bar{y} + G_u \bar{u} = 0 \tag{5.9}$$

feltételrendszer áll fenn. A feltételrendszert ki nem elégitő munkapont ellentmondásra vezetne.

Feladatunk tehát az, hogy megállapitsuk, milyen feltételek következnek az (5.3) összefüggés A_i, B_i együtthatóira vonatkozóan (5.9)-ből.

A tárgyalás egyszerüsitése érdekében vezessük be az

$$S_y = \sum_{i=0}^{p(y)} A_i \qquad \text{és} \qquad S_u = \sum_{i=0}^{p(u)} B_i \quad ,$$

jelöléseket. Ezekkel a hipermátrix-hipervektor szorzatként (5.6) és (5.9)

$$(S_y \mid S_u) \cdot \begin{pmatrix} \bar{y} \\ \hline \bar{u} \end{pmatrix} = 0 \quad , \tag{5.1o}$$

ill.

$$(G_y \mid G_u) \cdot \begin{pmatrix} \bar{y} \\ \hline \bar{u} \end{pmatrix} = 0 \tag{5.11}$$

alakba irható. Azt kivánjuk, hogy az (5.1o) homogén lineáris egyenletrendszernek csak olyan megoldásai lehessenek, amelyek (5.11)-et is kielégitik. Nyilvánvalóan ebből $(S_y \,\vdots\, S_u)$-ra nézve az a feltétel adódik, hogy valamilyen $n(g) \cdot n(y)$ méretü P mátrixszal fenn kell állnia a

$$P \cdot (S_y \,\vdots\, S_u) = (G_y \,\vdots\, G_u) \tag{5.12}$$

kapcsolatnak [33]. Látható, hogy (5.1o) teljesülése esetén az (5.12) feltételből következik (5.11), ui.

$$P \cdot (S_y \,\vdots\, S_u) \begin{pmatrix} \bar{y} \\ --- \\ \bar{u} \end{pmatrix} = (G_y \,\vdots\, G_u) \begin{pmatrix} \bar{y} \\ --- \\ \bar{u} \end{pmatrix} = 0 \quad ,$$

tehát a modellt kielégitő állandósult megoldás egyuttal a mérlegegyenleteket is kielégiti. Az is nyilvánvaló, hogy ha $n(g) < n(y)$, akkor P-nek nem létezik olyan P^- általánositott inverze, amivel $P^- \cdot P = I$ teljesülne, tehát az állitás forditott irányban nem áll fenn. Vagyis abból, hogy valamilyen $\bar{y}$, $\bar{u}$ vektorpár kielégiti az (5.11) mérlegegyenleteket, nem következik, hogy az a rendszer egy állandósult állapotának is megfelel.

Az (5.12) feltétel geometriailag megfogalmazva azt jelenti, hogy csak az olyan modell nem mond ellene a mérlegegyenleteknek, amellyel a $(G_y \,\vdots\, G_u)$ mátrix sorvektorai az $n(y)$ dimenziós vektorok terében az $(S_y \,\vdots\, S_u)$ mátrix sorvektorai által kifeszitett altérbe esnek.

Visszatérve a dinamikus modell együtthatók eredeti jelöléseire, a mérlegegyenletekkel való ellentmondásmentesség feltétele, hogy alkalmas közös P mátrixszal az A_i és B_i mátrixokra egyaránt fennálljon a

$$P \cdot \sum_{i=0}^{p(y)} A_i = G_y$$

és a (5.13)

$$P \cdot \sum_{i=0}^{p(u)} B_i = G_u$$

kapcsolat.

Alakilag ugyanilyen feltételrendszer áll fenn az ellentmondásmentes, munkapontra transzformált változókra érvényes lineáris dinamikus és statikus matematikai modellek együtthatói között is, amikor is az (5.11) összefüggésen a statikus modellt értjük. A különbség az egyenletek számában jelentkezik. Mig a mérlegegyenletek esetében az egyenletek száma $n(g) < n(y)$, modellek esetén $n(g) = n(y)$. Az utóbbi esetben mind P, mind G_y kvadratikus és szükségszerüen nem szinguláris, tehát adott P-vel az (5.12)–(5.13) feltételrendszer kölcsönös egymáshozrendelést jelent. Ui., minthogy P^{-1} létezik, (5.12)-n kivül fennáll az

$$(S_y \mid S_u) = P^{-1}(G_y \mid G_u) \tag{5.14}$$

kapcsolat is.

A következő részfejezetekben az itt közölt feltételeket a dinamikus modell együtthatók becsléséhez fogjuk felhasználni. Ezekben az (5.12) feltételrendszer az összevont

$$S = (S_y \mid S_u)$$

és

$$G = (G_y \mid G_u)$$

jelölésekkel

$$P \cdot S = G \tag{5.15}$$

alakban fog szerepelni.

5.3 A mérlegegyenleteket kielégitő együtthatók becslése

Célunk, hogy - amint azt a 4. fejezetben a statikus modellekkel tettük - az (5.3) tipusu lineáris dinamikus modell együtthatóit megfigyelések alapján ugy becsüljük a LKN elvének alkalmazásával, hogy a kapott modell ne legyen ellentmondásban a mérlegegyenletekkel, tehát elégitse ki az előző részfejezetben levezetett (5.15) feltételrendszert.

Feltételezzük, hogy rendelkezünk m számu y_j, u_j megfigyeléssel ($j=1,2,\dots,m$) és ismertnek tekintjük a rendszer rendjét, vagyis az (5.3) összefüggésben az összegezés felső határát: $p(y)$-t és $p(u)$-t. Nem foglalkozunk a munkapont meghatározásával, mert annak meghatározása lényegében ugyanugy történhet, mint a megszokott, feltétel nélküli együtthatóbecslés esetében. Mindenesetre, az előző részfejezet értelmében megköveteljük, hogy a munkapont, mint állandósult megoldás, kielégitse a mérgegegyenleteket. Ennek biztositására fel lehet használni a 3.3.táblázat $\hat{x}$-re vonatkozó korrekciós összefüggését. A továbbiakban csak munkapontra transzformált változók összefüggéseivel foglalkozunk.

5.3.1 Összevont jelölések

A lineáris modellek együtthatóbecslése során az áttekinthetőség javitása és az irásmunka csökkentése céljából az A_i, és B_i együtthatómátrixok és a munkapontra transzformált y_j, u_j megfigyelésvektorok összességére uj jelöléseket szokás bevezetni.

Rögzitsük a homogén (5.3) összefüggésben az A_o együtthatómátrixot

$$A_o = -I_{n(y)}$$

-nek, a többi együtthatómátrixot pedig egyesitsük

$$\Omega = (A_1 | \dots | A_{p(y)} | B_o | B_1 | \dots | B_{p(u)})$$

-ban. Legyen továbbá

$$\varphi(t) = \begin{pmatrix} y(t-\theta) \\ \vdots \\ y(t-i\theta) \\ \vdots \\ y(t-p(y)\theta) \\ u(t-k\theta) \\ u(t-(k+1)\theta) \\ \vdots \\ u(t-(k+i)\theta) \\ \vdots \\ u(t-(k+p(u))\theta) \end{pmatrix} .$$

Az (5.3) dinamikus modell ezekkel a jelölésekkel az

$$y(t) = \Omega \cdot \varphi(t) \tag{5.16}$$

alakot ölti.

Ha a t_o időpontra és az egymást egyenlő időközben követő szükséges időpontokra vonatkozólag rendelkezünk m számu összetartozó $\tilde{y}(t)$ és $u(t)$ megfigyelésekkel, akkor, bevezetve az

$$Y = (\tilde{y}(t_o) | \dots | \tilde{y}(t_o+(j-1)\theta) | \dots | \tilde{y}(t_o+(m-1)\theta))$$

és

$$= (\varphi(t_o)\,|\ldots|\,\varphi(t_o+(j-1)\theta)\,|\ldots\ldots|\,\varphi(t_o+(m-1)\theta)) =$$

$$= \begin{pmatrix}
\tilde{y}(t_o-\theta) & \ldots & \tilde{y}(t_o+(j-2)\theta) & \ldots & \tilde{y}(t_o+(m-2)\theta) \\
\vdots & & \vdots & & \vdots \\
\tilde{y}(t_o-i\theta) & & \tilde{y}(t_o+(j-i-1)\theta) & & \tilde{y}(t_o+(m-i-1)\theta) \\
\vdots & & \vdots & & \vdots \\
\tilde{y}(t_o-p(y)\theta) & & \tilde{y}(t_o+(j-p(y)-1)\theta) & & \tilde{y}(t_o+(m-p(y)-1)\theta) \\
u(t_o-k\theta) & & u(t_o+(j-k-1)\theta) & & u(t_o+(m-k-1)\theta) \\
u(t_o+(-k-1)\theta) & & u(t_o+(j-k-2)\theta) & & u(t_o+(m-k-2)\theta) \\
\vdots & & \vdots & & \vdots \\
u(t_o+(-k-i)\theta) & & u(t_o+(j-k-i-1)\theta) & & u(t_o+(m-k-i-1)\theta) \\
\vdots & & \vdots & & \vdots \\
u(t_o+(-k-p(u))\theta) & \ldots & u(t_o+(j-k-p(u)-1)\theta) & \ldots & u(t_o+(m-k-p(u)-1)\theta)
\end{pmatrix}$$

jelöléseket, az adott megfigyelésekkel a modell illeszkedésének hibájára az $n(y)\cdot m$ méretü

$$\Delta = Y - \Omega\Phi \tag{5.17}$$

mátrix adódik. Δ mátrix i,j-edik eleme, δ_{ij} az i-edik kimenet j-edik megfigyelésének és a modellből az azt megelőző megfigyelések alapján számitott értékének különbsége.

Fontos megjegyezni, hogy - szemben a statikus modellek illeszkedési hibáival - $\delta_{i,j}$ nem tekinthető az adott megfigyelés mérési hibájának, pontos modell és hibamentesen megfigyelt bemenet esetében sem, minthogy Φ hibával terhelt mennyiségeket is tartalmaz. Δ-t a dinamikus modellek együtthatóbecslésével foglalkozó irodalom egyenlethibának nevezi.

A mérlegegyenleteket jelentő (5.12), ill. (5.15) feltételrendszer megfogalmazásához vezessük be a

$$H = (-I_{n(y)} \mid O_{n(y),n(u)})$$

és a

$$\Sigma = \begin{array}{c l} \left[\begin{array}{c|c} I_{n(y)} & O_{n(y),n(u)} \\ \vdots & \\ I_{n(y)} & O_{n(y),n(u)} \\ \hline O_{n(u),n(y)} & I_{n(u)} \\ \vdots & \\ O_{n(u),n(y)} & I_{n(u)} \end{array}\right] & \begin{array}{l} p(y)\text{-1 sor} \\ \\ \\ \\ p(u) \text{ sor} \\ \\ \end{array} \end{array}$$

jelöléseket. Könnyen ellenőrizhető, hogy ezekkel

$$S = H+\Omega\Sigma \tag{5.18}$$

tehát az (5.15) feltételrendszer Ω-val kifejezve

$$P(H+\Omega\Sigma) = G \tag{5.19}$$

alakban adódik.

5.3.2 A legkisebb négyzetek elvének alkalmazása

Az előző pontban már rámutattunk arra, hogy az (5.16) matematikai modell független változói között megelőző időpontokhoz rendelt kimenetek is szerepelnek. Ebből következik az, hogy az (5.17)-tel definiált egyenlethiba mátrix nem azonos az adott kimenetek mérési hibáival, pontos modell és a bemenetek hibamentes ismerete esetében sem. Emiatt, mint az a dinamikus rendszerek identifikációjával kapcsolatosan közismert /lásd pl. [11]-et/, a $\Delta \cdot \Delta'$ mátrix nyomának Ω szerinti minimalizálásán alapuló LKN becslés normális eloszlás esetében sem azonos a ML becsléssel és általában nem is torzitatlan. Ismeretesek más algoritmusok, amelyek asszimptotikusan torzitatlan becslést szolgáltatnak, igy pl. az un. általánositott LKN [1o] és "instrumental variable" [5o] módszer. Mivel azonban ezek lényegesen nagyobb müveletigényüek az egyszerü LKN algoritmusnál, gyakorlati célokra gyakran alkalmazzák ez utóbbit is. Értekezésünkben csak a LKN együtthatóbecslés mérlegegyenletekkel korlátozott változatát ismertetjük. Feltehetőleg ennek mintájára a bonyolultabb torzitatlan becslést adó algoritmusok korlátozott változatai is kidolgozhatók.

A LKN elvének megfelelően képezzük a megfigyelések **Y** és Φ mátrixaival és az ismeretlen $\hat{\Omega}$ együtthatómátrixszal az illeszkedési hibák $\hat{\Delta}$ mátrixát

$$\hat{\Delta} = Y-\hat{\Omega}\Phi \tag{5.2o}$$

szerint és keressük azt az $\hat{\Omega}$-t, amivel - figyelembe véve a feltételrendszert is - $\hat{\Delta}$ $\hat{\delta}_{i,j}$ elemeinek sulyozott négyzetösszege minimális.

A 4.1.2 pontban alkalmazott megfontolásokkal analóg módon tehát az illeszkedési hiba mértékéül $\hat{\delta}_{i,j}$-k i és j szerint sulyozott négyzetösszegét,

$$f = \sum_{j=1}^{m} \sum_{i=1}^{n(y)} \left(\frac{\hat{\delta}_{i,j}}{\nu_i \omega_j}\right)^2$$

-et tekintjük.

Ugyanez mátrix irásmóddal

$$f = Tr(V^{-1/2}\Delta W^{-1}\Delta' V^{-1/2}) \tag{5.21}$$

ahol **V** és **W** értelmezése ugyanaz, mint az idézett 4.1.2 pontban.

Az (5.2o) összefüggést felhasználva, Ω mérlegegyenleteket kielégitő LKN becslése az

$$f = Tr(V^{-1/2}(Y-\Omega\Phi)W^{-1}(Y'-\Phi'\Omega')V^{-1/2}) \tag{5.22}$$

skalár-mátrix függvény Ω szerinti,

$$P(H+\Omega\Sigma)-G = O \tag{5.23}$$

feltételi egyenlettel korlátozott minimumhelye.

A minimumhely keresését megneheziti az a tény, hogy **P** is ismeretlen és f minimalizáláshoz azt is optimálisan kell megválasztani. Minthogy (5.23)-ban **P** és Ω szorzata szerepel, a feltételi egyenlet nem lineáris. Sikerült mégis a feladatot explicit módon megoldani. A megoldás részletes levezetését az F.12 függelékben közöljük, itt csak a gondolatmenet főbb lépéseit foglaljuk össze:

a/ A feltételrendszert /(5.23) összefüggés/ egy egyelőre ismeretlen kvadratikus, nemszinguláris **T** mátrixszal balról megszorozva transzformáljuk. Az ennek eredményeképpen adódó Π = **TP** mátrixot rögzitve, a feltételrendszer lineárissá válik az ismeretlen Ω és **T** mátrixokban.

b/ A Lagrange-multiplikátorok módszerével meghatározzuk rögzitett Π mellett a célfüggvény /(5.22) összefüggés/ feltételes minimumhelyét a keresett Ω és a feltételrendszerben szereplő **T** szerint. Ez háromismeretlenes szimultán mátrixegyenletre vezet, amit "mátrix-Gauss-eliminációval oldunk meg.

c/ Az igy nyert, Π-től függő, egyébként optimális Ω_Π mátrix képletszerü megoldását a célfüggvényben Ω helyébe helyettesitjük, igy az kizárólag Π függvényévé válik. A további feladat tehát a célfüggvény minimumát biztositó Π^o mátrix meghatározása.

d/ Az optimumhely meghatározását az a felismerés segiti, hogy a célfüggvény Π-től csak egy, a **G** mátrix rangjával egyenlő rangu **F** szimmetrikus projektormátrixon keresztül függ; az optimumhelynek megfelelő Ω^o mátrixhoz tehát Π^o ismerete nélkül is eljuthatunk, ha találunk olyan **G** rangjával egyenlő számu ortogonális egységvektor oszlopból álló **E** mátrixot, amelynek saját transzponáltjával való szorzata **F**-et adja. Ezzel **F** szimmetriáját, projektor tulajdonságát és **E** oszlopainak ortogonalitását kihasználva a célfüggvény

$$h = Tr(\mathbf{E}'\Gamma\mathbf{E})$$

alakra hozható /F12.15/ az

$$E'E = I$$

feltétellel, ahol Γ a megfigyelésekből és az ismert együtthatókból számitható pozitiv definit szimmetrikus mátrix.

e/ Az F.13 függelék szerint - ami Sztanó Tamás munkája - h globális minimuma ugy érhető el, hogy **E** oszlopainak a Γ mátrix legkisebb sajátértékeihez tartozó sajátvektorait választjuk.

f/ Az igy meghatározott $\mathbf{E}^o$ mátrix ismeretében $\mathbf{F}^o$ és abból Ω^o közvetlenül számitható.

Az ezek szerint kialakitott algoritmus Ω^o kiszámitására az F.12 függelék eredményei alapján a következő.

Számitsuk ki az alábbi mátrixokat:

$$L = (\Phi W^{-1} \Phi)^{-1}$$

$\Omega^* = YW^{-1}\Phi' L$ az együtthatómátrix szabad LKN becslése

$$S^* = H + \Omega^* \Sigma$$

$$N = (\Sigma' L \Sigma)^{-1}$$

$$Z = (N - NG'(GNG')^{-1} GN)\Sigma' L$$

$$\Delta^* = Y - \Omega^* \Phi$$

$$D^* = S^* Z \Phi$$

$$\Gamma = V^{-1/2}(\Delta^* W^{-1} D^{*\prime} + D^* W^{-1} \Delta^{*\prime} + D^* W^{-1} D^{*\prime}) V^{-1/2}$$

Képezzük Γ főtengelytranszformációját:

$\Gamma = X\Lambda X'$ Λ: Γ sajátértékeiből képzett diagonálmátrix

$X = (x_1, x_2, \ldots, x_{n(y)})$ X: Γ sajátvektorainak ortogonális egységvektorokból álló kvadratikus mátrixa;

Ezek ismeretében az optimumhely:

$E^{o} = (x_1, x_2, \ldots, x_{n(g)})$ — E^{o}: a Γ mátrix $n(g)$ számu legkisebb sajátértékéhez tartozó saját-vektoraiból, mint oszlopokból képzett mátrix;

$F^{o} = E^{o}E^{o\prime}$

$\Omega^{o} = \Omega^{*} - V^{1/2}F^{o}V^{-1/2}S^{*}Z$ — Ω^{o}: az optimális együtthatómátrix;

Az optimumhely számitásához nem szükséges, ellenőrzési célokra szolgáló mennyiségek:

$\Pi^{o} = \Theta E^{o\prime}V^{-1/2}$ — Θ: tetszőleges nemszinguláris kvadratikus mátrix, pl. $\Theta = I$;

$T^{o} = \Pi^{o}S^{*}NG'(GNG')^{-1}$

$P^{o} = T^{o\,-1}\Pi^{o}$

$f^{o} = Tr(V^{-1/2}\Delta^{*}W^{-1}\Delta^{*\prime}V^{-1/2}) + \sum_{i=1}^{n(g)} \lambda_i$ — a maradék hiba;

$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_{n(g)}$: a Γ mátrix $n(g)$ számu legkisebb sajátértéke.

Az algoritmus alkalmazására példa az M.3 mellékletben található.

6 EGY ALGORITMUS A RENDKIVÜLI MÉRÉSI HIBA HELYÉNEK BECSLÉSÉRE

Ha egy összetett mérést a 3.fejezetben ismertetett vizsgálat elfogadhatatlannak minősitett, különösen ha ez a jelzés nemcsak egyszer-egyszer következik be, hanem tartósan jelentkezik, akkor nagy valószinüséggel a mérlegegyenletekben szereplő mennyiségeket mérő müszerek javitása szükséges. Ha a müszerpark az üzemben nincs elhanyagolva és a jelentkező hibákat viszonylag gyorsan megjavitják, akkor feltételezhető, hogy nagy valószinüséggel a mérlegegyenlet rendszerben szereplő változók mérését végző müszerek közül egyidejüleg egynél több nem hibás.

Bár tapasztalati adataink a rendkivüli mérési hibák természetére vonatkozóan nincsenek, ésszerünek látszik annak a feltételezése, hogy a rendkivüli hiba nem a mérési hiba szórásának megnövekedésében, hanem várható értékének 0-tól való jelentős eltérésében nyilvánul meg /legalábbis az esetek többségében/, mint ahogy azt a 3.2.3 pont szerint a rendkivüli hiba vizsgálatánál is feltételeztük.

Az előzők szerint tehát indokolt azt feltételezni, hogy rendkivüli hiba esetén a mérési hiba várható érték vektora valamely koordináta tengely irányába mutat, vagyis csak egyetlen eleme különbözik 0-tól, varianciamátrixa pedig változatlan.

Legyen az r indexü méréshely hibájának várható értéke 0-tól különböző

$$E(\tilde{d}_r) = h \neq 0, \quad , \tag{6.1}$$

de minden más $j \neq r$ méréshelyre

$$E(\tilde{d}_j) = 0 \quad . \tag{6.2}$$

Ebben a fejezetben egy, az eddig ismertekhez képest [35, 43] kis müveletigényü algoritmust javasolunk, amely az előző feltétel teljesülése esetén alkalmas a rendkivüli hiba helyének kimutatására, a mérleghiba várható értéke, ill. annak becslése alapján.

A 3.2.3 pontban már tárgyaltuk a (3.7) összefüggéssel számitott f mérleghiba vektornak azt a tulajdonságát, hogy abszolut értéke nem invariáns a mérlegegyenletek ekvivalens transzformációjára. Ezért vezettük be ott az összetett mérések mérleghibájának mérőszámául a (3.25) összefüggés szerinti q^2 mennyiséget. Ugyanezen okból fogjuk itt a 6.fejezetben mérleghibaként a (3.17) összefüggéssel definiált

$$\tilde{\varphi} = (AV_{\tilde{d}}A')^{-1/2}\tilde{f}$$

normált mérleghiba vektort használni.

Ennek megfelelően a mérlegegyenletekből a mérési hiba vektorra adódó (3.1o) feltételrendszert $\tilde{f}$ transzformációjával összhangban az

$$M = (AV_{\tilde{d}}A')^{-1/2}A$$

jelölést bevezetve

$$M\tilde{d} = \tilde{\varphi} \tag{6.3}$$

alakban fogjuk alkalmazni.

A 3.fejezettel szemben itt $\tilde{d}$ eloszlásáról csak azt feltételezzük, hogy létezik várható értéke és varianciája, és (6.1-2) szerint

$$E(\tilde{d}) = e_r h \quad , \tag{6.4}$$

ahol e_r a mérési hibák terének r-edik koordináta egységvektora, r a rendkivüli hiba helyének indexe és h a rendkivüli hiba nagysága.

Képezzük $\tilde{\varphi}$ várható értékét. Ez nyilvánvalóan

$$E(\tilde{\varphi}) = E(M\tilde{d}) = ME(\tilde{d}) = Me_r h = m_r h \quad , \qquad (6.5)$$

ahol m_r a M mátrix r-edik oszlopa. Eszerint tehát kiindulási feltételeink teljesülése esetén a $\tilde{\varphi}$ normált mérleghiba vektor várható érték vektora párhuzamos M valamelyik oszlopával.

Ha a rendkivüli hiba helyét nem ismerjük és M-nek $E(\tilde{\varphi})$-mal csak egy párhuzamos oszlopa van, akkor a rendkivüli hiba helye az az r indexü mérőhely, amelyikre m_r párhuzamos $E(\tilde{\varphi})$-mal, azaz amelyikre (6.5) fennáll alkalmas skaláris h-val.

Ennek az elvnek a gyakorlati alkalmazása során természetesen $\tilde{\varphi}$ várható értéke helyett annak csak egy $\bar{\varphi}$ becslését ismerhetjük. Ezzel a párhuzamosság még a (6.4) feltétel teljesülése esetén sem áll fenn. Hibahely becslő algoritmusunk azon a feltételezésen alapul, hogy a mérleghiba vektor $\bar{\varphi}$ becslése és az m_r oszlopvektor ebben az esetben is közel párhuzamos, vagyis hogy a két vektor által meghatározott két egyenes egymással kis szöget zár be, feltéve, hogy h abszolut értéke elég nagy. Ha a rendkivüli hiba helyét nem ismerjük, feltehetjük, hogy az azzal az r indexü mérési hellyel azonos,amelyik r-rel az m_r vektor által és a $\bar{\varphi}$ által meghatározott egyenesek közötti hegyesszög a legkisebb.

Mint ismeretes, a két vektor közötti szög fogalma 3-nál nagyobb dimenziós terekre is általánositható, koszinuszuk

$$cos(a,b) = \frac{a'b}{(a'a)^{1/2}(b'b)^{1/2}} \qquad (6.6)$$

szerinti definiciójával.

Ennek megfelelően határozzuk meg sorra a M mátrix j-edik oszlopa és $\bar{\varphi}$ közötti szögek koszinuszát és jelöljük azt γ_j-vel:

$$\gamma_j = \frac{m_j'\overline{\varphi}}{(m_j'm_j)^{1/2}(\overline{\varphi}'\overline{\varphi})^{1/2}} \quad . \; j=1,2,\ldots,n(d) \tag{6.7}$$

Minthogy a rendkivüli hiba előjele ismeretlen és a hiba helye szempontjából amugy is érdektelen, az irányok egyezése tekintetében nem a két vektor közötti szög, hanem az általuk meghatározott egyenesek közötti hegyesszög a mértékadó. Ennek megfelelően az irányok egyezésének, ill. különbözőségének jellemzésére a vektorok közötti szög koszinusza helyett annak abszolut értékét kell tekinteni. Eszerint a rendkivüli hiba helyét az az r index jelzi, amivel $|\gamma_r| > |\gamma_j|$ minden $j \neq r$-re.

Ha a hibahely ellenőrzésére és kimutatására egy adott rendszerben gyakran, ismételten van szükség, célszerü a megfigyelési eredményektől független számitási részleteket előre elvégezni. Képezzük valamennyi m_j irányu egységvektort és jelöljük azokat c_j-vel:

$$c_j = m_j(m_j'm_j)^{-1/2} \tag{6.8}$$

és ezek transzponáltjaiból mint sorvektorokból a C mátrixot:

$$C = \begin{bmatrix} c_1' \\ c_2' \\ \vdots \\ c_{n(d)}' \end{bmatrix} .$$

A $\overline{\varphi}'\overline{\varphi}$ szorzatot jelöljük q^2-tel, végül a γ_i mennyiségek vektorát γ-val:

$$\gamma = \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \vdots \\ \gamma_{n(d)} \end{bmatrix}$$

Ezzel a γ_i mennyiségek kiszámitását esetenként a

$$\gamma = C\overline{\varphi}\cdot\frac{1}{\sqrt{q^2}} \qquad (6.9)$$

összefüggés szerint lehet elvégezni, aminek az az előnye, hogy a viszonylag hosszadalmasabb számitást igénylő **C** mátrixot csak egyszer kell előre kiszámitani, q^2-et pedig a rendkivüli hiba létezésének jelzéséhez a 3.2.3 pont szerint amugy is ki kellett számitanunk. Igy a hibahely kimutatásához szükséges γ vektor meghatározását esetenként egyszerüen meg lehet valósitani.

A rendkivüli hiba helyének kimutatása a becsült $\overline{\varphi}$ mérleghiba vektor alapján nem történik teljes biztonsággal, mert a 0-tól különböző várható érték mellett mindig, minden mérőhelyen fellép a szokásos véletlen hiba, aminek a sulyát átlagolással csak csökkenteni, de megszüntetni nem lehet. A helyes "találat" valószinüségének meghatározására mindezideig nem sikerült gyakorlatilag használható összefüggést levezetnünk. Ezért a módszer hatékonyságát gyakorlati alkalmazása előtt csak szimulációval tudjuk vizsgálni az adott rendszer paramétereit ismerve, az egyes mérőhelyeken fellépő rendkivüli hiba mértékének függvényeként.

Feltehető az a kérdés, hogy miért nem használtuk az összefüggések levezetéséhez (6.3) helyett a 3.fejezetbeli (3.19) normált feltételrendszert, ahol $\tilde{f}$-on kivül $\tilde{d}$-ot is független egységszórásu vektorrá normáltuk. Ennek a normálásnak itt az lett volna a következménye, hogy végül is az algoritmus a rendkivüli hiba helyeként valamelyik normált hibakomponenst mutatta volna ki, ami abban az esetben, ha $V_{\tilde{d}}$ nem diagonális, nem azonositható egyetlen valóságos mérőhellyel sem. Könnyen belátható ugyanakkor az is, hogy az itt ismertetett algoritmus $\tilde{d}$ normálása nélkül is invariáns a mérlegváltozók léptékére.

Az algoritmus használhatóságát a 4.melléklet mintapéldáján mutatjuk be. A melléklet első része Ripps közleményének egy részlete [35], ami megmutatja, hogy a maximális abszolut értékü korrekció nem jelentkezik feltétlenül a maximális abszolut értékü hiba helyén, és eléggé hosszadalmas algoritmust ajánl a rendkivüli hiba helyének megkeresésére. Ugyanennek a mellékletnek a 2. része ehhez kapcsolódóan a Ripps féle mintapéldán bemutatja az ebben a fejezetben ismertetett algoritmus alkalmazását, ami lényegében azonos feltételezésből kiindulva direkt módszerrel mutat rá a hibás mérés helyére. Az 5.melléklet az algoritmus hatékonyságának a rendkivüli hiba mértékétől való függését mutatja be szimulációs kisérletek segitségével. Ez a melléklet részlet egy közleményünkből [4], amiben az itt leirt algoritmust ismertettük.

7 ÖSSZEFOGLALÁS – KONKLÚZIÓK

Az értekezésben közölt összefüggések és algoritmusok gyakorlati jelentőségére már az általános bevezetésben és az egyes fejezetek bevezetésében is igyekeztem rámutatni. Itt a konkrét lehetőségek ismeretében összefoglalom a gyakorlati alkalmazás területeit. Felsorolok néhány, a tárgykörrel kapcsolatos megoldatlan kérdést, végül tételesen felsorolom az értekezés uj tudományos eredményeit.

7.1 Gyakorlati alkalmazási lehetőségek

Az értekezés 3.2.3 pontjában tárgyalt hibaellenőrzési algoritmus mindazon esetekben használható, amikor a mérésekkel megfigyelt komponens- ill. hőmennyiségek vagy áramok valóságos értékei között lineáris mérlegegyenletek állnak fenn. Ilyen mérlegegyenletek érvényesek elágazó hálózatok tömegáramai között, folytonos üzemü vegyipari eljárások állandósult állapotában megfigyelt komponensáramai és hőcserélőkben vagy hőcserélő rendszerekben áramló áramok hőáramai között. A mérlegegyenletek rendszere ezek kombinációiból is állhat. Reaktorokra pl. a reakciók entalpiaváltozásait figyelembe véve egyidejüleg mind komponens, mind hőmérlegeket lehet értelmezni. Kiindulási feltevéseinkből következik, hogy mindezek a mérlegegyenletek csak addig használhatók igy hibaellenőrzésre, amig az esetleg valójában több mérésből számitott komponensáramok és hőáramok megfigyelési hibája közelitőleg normális eloszlásu "mért" menynyiségnek tekinthető. Analóg feltételek mellett használható a mérési hiba ellenőrző algoritmus szakaszos vegyipari müveletek vagy laboratóiumi kisérletek mérlegeinek ellenőrzésére is.

Az ellenőrzéssel kellő biztonsággal kiszürhetők a mérlegegyenleteknek ellentmondó mérések, megnövelve igy a megmaradó mérési értékek megbizhatóságát, meggyorsitva egyuttal a rendkivüli mérési hibák vagy veszteségforrások felismerését.

Az értekezés 3.2.4 pontja tartalmazza a mérési hibák kiegyenlitésének tárgyalását. Ez a müvelet csak akkor megengedett, ha az előbbiekben ismertetett ellenőrzés nem jelez rendkivüli hibát. Ekkor az algoritmus a kiindulási feltételek teljesülése esetén a legnagyobb valószinüségü üzemállapotot szolgáltatja. A hibakiegyenlités kettős előnnyel jár: biztositja egyrészt a becsült mennyiségek ellentmondásmentességét, másrészt, alkalmazásával a mérlegegyenletekben rejlő információk felhasználása révén növelhető a megfigyelt értékek pontossága.

A 3.3 és 3.4 részfejezetek a tapasztalati varianciamátrix alkalmazását ismertetik a hibaellenőrzéshez. Ennek megvalósitásához szükség van a rendszeres hibaellenőrzés megkezdése előtt egy rendkivüli hibától mentes megfigyeléssorozatra az empirikus varianciamátrix meghatározása céljából. Ha ez technikailag lehetséges, akkor az egyébként nehezen és csak bizonytalanul meghatározható varianciamátrix viszonylag könnyen és megbizhatóan becsülhető. A 3.3 részfejezet az empirikus varianciamátrixszal képzett kvadratikus alak eloszlását vizsgálja. A 3.4 részfejezet az autokorrelálatlan és autokorrelált rendkivüli hibák megkülönböztetésének egy lehetőségét tárgyalja. Gyakorlatilag ennek az a jelentősége, hogy autokorrelálatlan rendkivüli hiba esetében csak az adott pillanathoz rendelt mérést kell elvetni, mig autokorrelált rendkivüli hiba esetében a hiba forrásának megszüntetése ügyében is intézkedni kell.

A rendkivüli hiba helyének megkereséséhez kiván eszközt adni a 6.fejezetben közölt algoritmus. Ez abból a feltételezésből indul ki, hogy a mérési hiba eloszlása rendkivüli hiba fellépésekor csak a hiba várható értékének hirtelen megváltozásában jelentkezik. Feltételezi ezenkivül, hogy a várható érték vektornak csak egyetlen komponense különbözik 0-tól, vagyis, hogy egyidejüleg csak egy müszer hibás. Ez a gyakorlatban akkor következik be, ha a müszerek meghibásodásának gyakorisága nem tulságosan nagy, a karbantartás pedig elég gyors ahhoz, hogy a hibát a következő hiba bekövetkezése előtt megszüntesse. Ha ez a feltétel elég nagy valószinüséggel teljesül, akkor az algoritmus igen egyszerü, gyors segédeszköz a hiba helyének megkeresésére.

Hangsulyozni kivánom, hogy a felsorolt eljárások mindegyike igen egyszerü, könnyen programozható és csekély számitási időt igényel, igy gyakorlati megvalósitásuk kis számitógéppel, sőt, nem nagy változószámu rendszereknél mikroszámitógéppel is különösebb nehézség nélkül megoldható, különösen, ha az együtthatómátrixokat, mint állandókat előre kiszámitjuk.

A matematikai modellek mérleghelyessége különösen összetett rendszerek szimulációja vagy optimálása során fontos követelmény. A 4. és 5. fejezet matematikai modellek mérleghelyes együtthatóbecslésével foglalkozik, vagyis olyan modellek létrehozását tárgyalja, amelyek tetszőleges bemenetre mérleghelyes kimenő változó értékeket szolgáltatnak. A 4. fejezet az állandósult állapotot leiró modelleket, az 5. fejezet a diszkrét dinamikus modelleket vizsgálja. Mindkét fejezet lineáris együtthatóbecslésre szoritkozik. Az állandósult állapotot leiró modelleknél az algoritmus kiterjeszthető a csupán együtthatóiban lineáris modellek együtthatóbecsléseire is, ebben az esetben azonban a becslés tulajdonságait nem ismerjük. Dinamikus rendszerekre az együtthatóbecslési módszer kidolgozása előtt magának a dinamikus modell mérleghelyességének fogalmát is tisztázni kellett.

A mérési hibák ellenőrzésére és kiegyenlitésére, valamint a rendkivüli hiba helyének jelzésére kidolgozott algoritmusok bevezetése az ipari gyakorlatba a már emlitett előnyeik miatt igen indokolt és hasznos volna. Mégis,ennek ma nehezen leküzdhető akadályai vannak. Ezek az alábbiak:

- A vegyipari üzemek müszerezését szinte általánosan legfeljebb a minimálisan szükségesre tervezik, kihasználva minden lehetőséget, ahol valamely érték más mért mennyiségekből mérlegek alapján számitható. Az ilyen, rosszul értelmezett takarékoskodás lehetetlenné teszi a mérések rendszeres ellenőrzését és azt, hogy az üzem vezetői a folyamatról a valóságnak megfelelő, megbizható információhoz jussanak. Arra kellene tervezéskor törekedni, hogy minden lényeges tömeg- ill. komponensáram mérést legalább egy mérleggel ellenőrizni lehessen. Sajnos ennek gazdasági kihatásai közül csak a negativ, a müszerezés költsége mérhető fel összegszerüen, előnyei csak közvetve jelentkeznének.
- A vegyipari üzemekben az eleve szükösre tervezett müszerpark kisebb-nagyobb hányada meghibásodás miatt tartósan vagy időlegesen nem müködik. A hibás müszerek javitása alkatrész vagy karbantartó létszám hiánya miatt elmarad, tovább csökkentve az üzemről nyert információ mennyiségét és a meglévő mérések megbizható müködésének ellenőrzési lehetőségét, pedig nagy a valószinüsége annak, hogy olyan helyeken, ahol a müszerek nagy hányada müködésképtelen, a még müködőknek is jelentős hányada a megengedhetőnél nagyobb hibával mér.
- A javasolt algoritmusok rendszeres alkalmazása számitógépet igényel, igy elsősorban ott jöhet számitásba, ahol az üzemi adatgyüjtésre és adatfeldolgozásra számitógép beállitásra egyébként is sor kerül. Ebben az esetben a szóbanforgó számitások számitógépigénye mind memória,mind időigény szempontjából viszonylag csekély, tehát azok gyakorlatilag szinte külön költség nélkül megvalósithatók volnának. Bizonyos esetekben esetleg éppen az információk megbizhatóságának ellenőrzése és javitása indokolhatja számitógép beállitását.

7.2 Néhány nyitott kérdés

Tudatában kell lennünk annak, hogy az értekezés a témakört nem meritette ki, sőt számos megoldatlan kérdést vet fel. Ezek közül néhányat az alábbiakban cimszavakban felsorolok:

- a térben diszkrét rendszerek és a térben folytonos rendszerek mérlegegyenleteinek közös alakja;
- az empirikus mérési hiba varianciamátrix meghatározási lehetőségeinek vizsgálata;
- az empirikus varianciamátrix alapján végzett hibaellenőrzés tulajdonságainak vizsgálata;
- a folyamatos mérések hibáinak sztochasztikus folyamatként való értelmezése. A hagyományos véletlen és módszeres hiba fogalom értelmezése erre az esetre;
- hibaellenőrzés és kiegyenlités normálistól eltérő eloszlás esetén. A nem normális eloszlások normális eloszlással való közelitésének problémái. A LKN közelités és lineáris programozás alkalmazása közötti választás szempontjai;
- a mérlegváltozók korlátozott tartományai /pl. nem-negativitás vagy (0,1) intervallum/ esetén alkalmazható elméletileg és gyakorlatilag egyaránt elfogadható algoritmusok;
- szekvenciális hibaelemzés;
- a mérlegegyenletekkel korlátozott együtthatóbecslés rekurziv megvalósitása az ismert rekurziv LKN becsléssel analóg módon;
- a csak együtthatókban lineáris matematikai modellek becslésének statisztikai tulajdonságai;
- a dinamikus modellek mérlegegyenleteket kielégitő torzitatlan együtthatóbecslése a torzitatlan együtthatóbecs-

lési módszerekkel analóg módon;

- a Kalman-szürő elvének alkalmazása mérlegegyenletek figyelembevételével;
- a rendkivüli hiba helyét kimutató algoritmus megbizhatóságának matematikai-statisztikai értékelése;
- a rendkivüli hiba helyének kimutatási lehetőségei egynél több mérőműszer hibája esetén;
- a mérési hiba kiegyenlitési algoritmus áttekinthető mátrix formalizmussal való leirása bilineáris mérlegegyenletek esetén, az egységes és világos tárgyalásmód érdekében;
- a folytonos dinamikus modellek mérlegegyenleteket kielégitő együtthatóbecslése;
- a dinamikus modellek mérleghelyességének általános szükséges és elégséges feltétele.

7.3 Uj tudományos eredmények

Az értekezésben egységes szemlélet- és tárgyalásmóddal elemeztem a mérlegegyenletek felhasználásának lehetőségeit a mérési eredmények megbizhatóságának ellenőrzésére és növelésére. Felismerve továbbá a közelitő matematikai modellek mérleghelyességének jelentőségét, eljárást javasoltam mind a statikus, mind a dinamikus modellek együtthatóinak olyan korlátozott legkisebb négyzetes becslésére, amely biztositja, hogy a kapott modell bármilyen bemenetre mérleghelyes megoldást adjon.

Az értekezésben található uj tudományos eredmények tételesen a következők:

1. Kimutattam, hogy ismert varianciáju és kovarianciáju 0 várható értékü normális eloszlásu mérési hibák esetében a lineáris mérlegegyenletekkel egymáshoz rendelt mennyi-

ségek mért értékeivel számitott mérleghibákból képzett vektor normális eloszlásu vektorváltozó. A mérleghiba vektor saját varianciamátrixának inverzével képzett kvadratikus alakja ebből következően χ^2 eloszlásu, az eloszlás szabadsági foka pedig a független mérlegegyenletek számával egyenlő.

2. Kimutattam, hogy az 1. szerint képzett kvadratikus alak a legalkalmasabb a rendkivüli mérési hibával terhelt mérések mérlegegyenletekkel történő kiszürésére, rendkivüli hibán a 0-tól szignifikáns módon eltérő várható értékü hibát értve. Bizonyitható ui., hogy a szóbanforgó kvadratikus alaknak alkalmas állandó értékkel való összehasonlitása a matematikai statisztika szóhasználata szerint "legerősebb" teszt arra, hogy a mérési hibák várható értékének abszolut értéke 0. Ez azt jelenti, hogy az adott feltételek mellett nem létezik olyan más ellenőrzési módszer, amellyel az elsőfaju hiba valószinüségét rögzitve, a másodfaju hiba valószinüsége a szóbanforgó ellenőrzési módszer másodfaju hibájánál, bármilyen 0-tól eltérő várható értéket megengedve, kisebb lehetne.

3. Megállapitottam, hogy a rendkivüli mérési hibák mérlegegyenletekkel történő kiszürésére a mérleghibák vektorának saját empirikus varianciamátrixával képzett kvadratikus alakja is alkalmas. Ez a kvadratikus alak, mint valószinüségi változó, normális eloszlásu hibák esetén Hotelling-féle T^2 eloszlásu, ami Fisher-féle eloszlásu változóvá transzformálható. A rendkivüli hibák vizsgálata ennek megfelelően végezhető el a szokásos módon.

4. Kimutattam, hogy a müszerek nullponthibájának ellenőrzésére célszerü a leirt hibaelemzést a mérleghiba vektorok átlagával képzett kvadratikus alak alapján végezni. Az időben független mérési hibák /fehér zaj/ hatásához képest az időben állandó 0-tól különböző várható érték sulya ui. a megfigyelések számának növelésével nő.

5. Rámutattam, hogy az összetartozó mérések mérési hibáinak vektorát két hiba összegeként célszerü tekinteni, ahol az egyik összetevő méréshelyenként független és megfelel az adott mérőmüszer és mérőhely saját, a többi hibától független hibájának, a másik összetevő a különböző méréshelyekre együttesen ható hibaösszetevő. Ez utóbbit közelitésképpen, mint egy, a közös hibaforrásoktól determinisztikusan lineárisan függő vektort tekinthetjük. Ilyen módon lehetőség van a mérési hibák varianciamátrixában az átlón kivüli elemek közelitő meghatározására.

6. Algoritmust dolgoztam ki statikus lineáris matematikai modellek együtthatóinak lineáris mérlegegyenletekkel korlátozott becslésére. Az igy kapott modell bármilyen bemenő változó vektor behelyettesitésével mérleghelyes kimenetet szolgáltat. Kimutattam, hogy az igy nyert együtthatókkal a modell a kimenet torzitatlan becslését adja, és hogy az igy becsült együtthatókkal számitott kimenetek hibájának szórása kisebb, mint a szabad legkisebb négyzetes becsléssel nyert együtthatókkal számitott kimenet hibájának szórása.

7. Meghatároztam a diszkrét dinamikus lineáris időinvariáns rendszermodellek mérleghelyességének egy szükséges feltételét abból a követelményből kiindulva, hogy az állandó bemenettel adódó állandósult kimenetek elégitsék ki a mérlegegyenleteket.

8. Algoritmust dolgoztam ki a több-bemenetü, több-kimenetü diszkrét dinamikus lineáris időinvariáns matematikai modellek együtthatóinak lineáris mérlegegyenletekkel korlátozott becslésére. Az igy kapott együtthatókkal a modell bármilyen állandó bemenő változó vektorral mérleghelyes állandósult kimenetet ad.

9. Algoritmust dolgoztam ki a rendkivüli mérési hiba helyének kimutatására a mérleghibák várható értéke vagy annak

becslése alapján, abból a feltételezésből kiindulva, hogy rendkivüli hiba csak egyetlen méréshelyen lép fel.

JELÖLÉSEK JEGYZÉKE

Általánosan használt jelölések

F	Fisher eloszlás
N	normális /Gauss/ eloszlás
W	Wishart eloszlás
$d(.)$	a differenciál operátor
$exp(.)$	exponenciális függvény
$f(.)$	az argumentum függvénye általában /sürüségfüggvény a 3. fejezetben/
$g(.)$	az argumentum függvénye általában
$lim(.)$	határérték
$n(.)$	halmazok számossága, vektorok elemszáma
$p(.)$	a rendszer rendje az argumentumban meghatározott változóra nézve
$r(.)$	mátrix rangja
$vec(.)$	mátrix → vektor transzformáció
$C(.,.)$	kovariancia
$E(.)$	várható érték
$L(.)$	likelihood függvény
$Tr(.)$	mátrix nyoma
$V(.)$	variancia
Δ	differenciaoperátor
$\sum$	összegezés

Jel	Fejezet	É r t e l m e z é s	Első előfordulás (képletszám)
b	2,3	a mért mérlegváltozók közötti mérlegegyenlet állandó tagjának vektora	(2.32)
	4	a matematikai modell állandó vektora	(4.1)
c	3	a mért mérlegváltozók korrekció vektora	3.1 tábl.
	6	m irányu egységvektor	(6.8)
d	3,6	a mérlegváltozók mérési hibáinak vektora	3.1 tábl.

Jel	Fejezet	É r t e l m e z é s	Első előfordulás képletszám
e	3	a független mérési hiba komponens vektora	(3.4)
	6	koordináta egységvektor	(6.4)
f	3,6	mérleghiba vektor	3.1 tábl.
f	4	illeszkedési hiba négyzetösszeg	(4.11)
	5	illeszkedési hiba mérték	(5.21)
g	2	a mérlegegyenlet ismert tagjainak összegvektora	(2.24)
	3	közös mérési hiba forrásvektora	(3.4)
	5	a feltételrendszer állandó vektora	(5.7)
h	3	a normált mérlegegyenlet állandó vektora	(3.13)
	4	a feltételrendszerek állandó vektora	(4.2)
h	6	a rendkivüli hiba nagysága	(6.1)
i	2	részrendszer	(2.3)
i	5	az előző időpontokra utaló futó egész változó	(5.3)
j	5	a megfigyelések futó indexe	(5.16)
k	2	komponens	(2.12)
k	5	holtidő	(5.3)
ℓ	2	reakció	(2.12)
m	2	elemmennyiség	(2.1)
	5	a megfigyelések száma	(5.16)
q	2	az ismert vagy becsülhető mennyiségek vektora	(2.25)
q	3,6	hibamérték	(3.25)
r	2	elemátmenet	(2.6)
	6	a rendkivüli hiba helyének indexe	(6.1)
s	2	eredő elemátmenet	(2.7)
t	2,3,5	időpont	(2.1)
u	2	a mérlegegyenlet állandó vektora	(2.23)
	4,5	a független változók vektora	(4.1)
v	2	a mérlegváltozók vektora	(2.17)
w	2	az ismert értékü mérlegváltozók vektora	(2.2o)
x	2,3	a mérés utján megfigyelhető mérlegváltozók vektora	(2.2o)
y	2	a méretlen és ismeretlen értékü mérlegváltozók vektora	(2.2o)
	4,5	a függő változók vektora	(4.1)
z	2	átalakulás	(2.12)

Jel	Fejezet	Értelmezés	Első előfordulás (képletszám)
A	2,3,6	a mért mérlegváltozók közötti mérlegegyenlet együtthatómátrixa	(2.32)
	5	a függő változók együtthatómátrixa a dinamikus matematikai modellben	(5.3)
B	4	a matematikai modell együtthatómátrixa	(4.1)
	5	a független változók együtthatómátrixa a dinamikus matematikai modellben	(5.3)
C	2	mérlegegyenlet együtthatómátrixa	(2.14)
	6	együtthatómátrix	(6.9)
D	3	a sürüségfüggvény állandó faktora	(3.33)
E	4	a modell illeszkedési hiba vektorokból képzett mátrix	(4.11)
F	3	a mérleghiba vektorból képzett mérleghiba mátrix	(3.41)
G	3	a normált mérlegegyenlet együtthatómátrixa	(3.12)
	4	a feltételrendszer függő változóihoz tartozó együtthatómátrix	(4.2)
	5	a feltételrendszer együtthatómátrixa	(5.7)
H	3	a null, illetve ellenhipotézis	(3.27)
H	4	a feltételrendszer független változóihoz tartozó együtthatómátrix	(4.2)
	5	állandó mátrix	(5.18)
I		egységmátrix	
I	2	a részrendszerek halmaza	(2.3)
K	2	a komponensek halmaza	(2.12)
L	2	a reakciók halmaza	(2.12)
M	2	komponenstartalom mátrix	(2.12)
	6	a transzformált mérlegegyenlet együttható mátrixa	(6.3)
N	2	sztöchiometriai együttható mátrix	(2.12)
P	2	permutáló mátrix	(2.2o)
	5	transzformációs mátrix	(5.12)
Q	2	a mérlegegyenlet transzformációs mátrixa	(2.25)
R	2	elemátmenetek mátrixa	(2.8)
S	2	eredő elemátmenetek mátrixa	(2.9)
	5	a modellegyüttható mátrixok összege	(5.1o)

Jel	Fejezet	É r t e l m e z é s	Első előfordulás (képletszám)
T	2	az értelmezett időpontok halmaza	(2.1)
T	3	hibamérték	(3.43)
U	3	a mérleghiba mátrix saját transzponáltjával való szorzata	(3.41)
	4	a független változók összességéből képzett mátrix	(4.12)
V	2	a mérlegegyenlet együttható mátrixa	(2.17)
	3,6	varianciamátrix	(3.2)
	4,5	a függő változók reciprok sulymátrixa	(4.11)
W	2	a mérlegegyenlet ismert értékü mérlegváltozókhoz tartozó együtthatóinak mátrixa	(2.21)
	4,5	a megfigyelési időpontok reciprok sulymátrixa	(4.11)
X	2	a mérlegegyenlet méréssel megfigyelhető mérlegváltozóihoz tartozó együtthatóinak mátrixa	(2.21)
Y	2	a mérlegegyenlet méretlen mérlegváltozóihoz tartozó együtthatóinak mátrixa	(2.21)
	4	a függő változók összességéből képzett mátrix	(4.12)
	5	a megfigyelt kimenetek mátrixa	(5.17)
Z	2	az átalakulások mátrixa	(2.12)
α	3	szignifikanciaszint	(3.29)
γ	3	normált korrekció vektor	(3.16)
	6	a normált mérlegegyenlet együtthatómátrix oszlopa és a mérleghiba vektor közötti szög koszinusza	(6.7)
δ	3	normált mérleghiba vektor	(3.15)
ε	4	modell illeszkedési hiba vektor	(4.9)
θ	5	mintavételezési időintervallum	(5.3)
ν	2	sztöchiometriai együttható	(2.12)
	4	a megfigyelések reciprok sulya	(4.1o)
ξ	3	normált mérlegváltozó vektor	(3.14)
$\underset{\cdot}{\sigma}$	2	az eredő elemátmenetek vektora	(2.11)
τ	3	hibamérték	(3.44)
φ	3,6	normált mérleghiba vektor	(3.17)
	5	a modell egyesitett független változó vektora	(5.16)
χ	3	a megfelelő eloszlás jele	(3.26)

Jel	Fejezet	É r t e l m e z é s	Első előfordulás képletszám
ω	4	az időpontok reciprok sulya	(4.1o)
Γ	3	a közös forrásu mérleghibák együttható-mátrixa	(3.4)
Θ	3	a mérlegváltozók mérési hibájának várható érték vektora	(3.2)
Σ	2	az eredő elemátmenetek mátrixa több-komponensü rendszereknél	(2.13)
	5	összegező mátrix	(5.18)
Φ	5	a megfigyelések egyesitett független változó mátrixa	(5.17)
Ω	5	egyesitett modellegyüttható mátrix	(5.16)

HIVATKOZÁSOK JEGYZÉKE

1 Almásy, G., Sztanó, T., Csillag, P., Veress, G., Holderith,J.: 3. CHISA Kongresszus, Marianské Lázné, Csehszlovákia, 1969.

2 Almásy, G.A., Inzelt, P.A., Molnárné Jobbágy M.: Use of Electronic Computers in Chemical Engineering. EFCE Konferencia, Párizs, 1973.

3 Almásy, G.A., Veress, G.E., Vadnai, Sz.A., Ser, V.: Hung. Journal of Ind. Chem., 2, 117 /1974/.

4 Almásy, G.A., Sztanó, T.: Problems of Control and Information Theory, 4, 57 /1975/.

5 Almásy, G.A., Sztanó, T.: EFCE Kongresszus, Párizs, 1978. C2.

6 Asbjørnsen, O.A., Hertzberg, T.: Chem. Eng. Sci., 29, 679 /1974/.

7 Athans, M.: Information and Control, 11, 592 /1968/.

8 Åström, K.J.: Introduction to Stochastic Control, Acad. Press, New York-London, 197o.

9 Clair, R., Caujolle, J.P., Lebourgeois, F., Bonard, G.: EFCE Kongresszus, Párizs, 1978.

1o Clarke, D.W.: IFAC Szimpózium, Prága, 1967.

11 Eykhoff, P.: System Identification, Parameter and State Estimation. J. Wiley and Sons, New York-London-Sidney-Toronto, 1974.

12 Gergely József: Személyes közlés, 1968.

13 Gertler, J., Almásy, G.: IFAC "DISCOP" Szimpózium, Győr, 1971.

14 Gertler, J., Almásy, G.A.: Automatica, 9, 79 /1973/

15 Gertler J.: Egy statisztikus szürési eljárás számitógépes folyamatirányitáshoz. Doktori értekezés, Budapest, 1979.

16 Grossmann, W.: Grundzüge der Ausgleichungsrechnung /2.Ausgabe/. Springer Verlag, Berlin, 1961.

17 Hartman, K./szerk./: Analysis und Steuerung von Prozessen der Stoffwirtschaft. Akademieverlag, Berlin, 1971.

18 Henley, E.J., Rosen, E.M.: Material and Energy Balance Computations. J. Wiley and Sons, New York, 1969.

19 Hoffmann, R., Müller, R.: Messen, Steuern, Regeln, 9, 233 /1966/.

2o Jedlovszky P.: Személyes közlés, 1967.

21 Kafarov, V.V., Perov, V.L., Mesalkin, V.P.: Vegyipari rendszerek matematikai modellezése. Müszaki Könyvkiadó, Budapest, 1977.

22 Kalman, R.E.: ASME J. Basic Eng., 82, 35 /196o/.

23 Kaufmann, F., Hoffmann, V., Hoffmann, H.: Chemie-Ing.-Techn., 45, 45o /1973/.

24 Kauschus, W.: Személyes közlés, 1975.

25 Kendall, M.G., Stuart, M.A.: The Advanced Theory of Statistics. Vol. 2, 228. Hafner, New York, 1967.

26 Kuehn, D.R., Davidson, H.: Chem. Eng.Progress, 57, No.6, 44 /1961/.

27 Linnik, Ju.V.: Metod Nejmensüh Kvadratov i Osznovü Matematiko-sztatiszticseszkoj Teorii Obrabotki Nabljugyenii. Fizmatgiz, Moszkva, 1958.

28 Mathiesen, N.L.: Automatica, 1o, 431 /1974/.

29 Murthy, A.K.S.: Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., 12, 246 /1973/.

3o Nagijev, M.F.: Chem. Eng. Progress, 53, 297 /1957/.

31 Nogita, Sh.: Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., 11, 197 /1972/.

32 Neudecker, H.: Amer. Statistical Assoc. J., 953 /1969/.

33 Rao, C.R.: Linear Statistical Inference and its Application, 2nd ed., J. Wiley and Sons, New York-London-Toronto-Sidney, 1973.

34 Reinig, G.: A PCK Schwedt /NDK/ Kombinát nyomástávadóinak kalibrációs hibái; személyes közlés, 1975.

35 Ripps, D.L.: Chem. Eng. Progress Symp. Ser., 61, 8 /1965/.

36 Rooney, T.B., Mehra, R.K., Kramerich, G.L., Evans, L.B.: IFAC 7th World Congress, Helsinki, 1978, 9A.

37 Swenker, A.G.:Acta IMEKO, 29-48, Budapest, 1964.

38 Swenker, A.G.: Technisch Watensappelijk Onderzoek, 5,0-65, /1971.május 28./.

39 Vadnai Sz., Almásy G., Ser V., Veress G.: Magy.Kém.Lapja, 29, 534 /1974/.

4o Vadnai,Sz., Almásy,G., Ser,V., Veress,G.: International Chemical Engineering, 15, 465 /1975/.

41 Václavek, V.: Coll. Czech. Chem. Commun., 34, 2662 /1969/.

42 Václavek, V.: Chem. Eng. Sci., 29, 23o7 /1974/.

43 Václavek, V.: Scientific Papers of the Prague Institute of Chemical Technology, K9, 75 /1974/.

44 Václavek, V., Kubicek, M., Loucka, M.: Teoreticseszkije Osznovü Himicseszkoj Technologii, 9, 27o /1975/.

45 Václavek, V., Loucka, M.: Chem. Eng. Sci., 31, 1199 /1976/.

46 Virág T.: Áramlástanilag lineáris vegyipari berendezések matematikai modelljének egységes kezelése. Kandidátusi értekezés, Budapest, 1979.

47 Virág, T., Almásy, G., Vlickle, T.: EFCE CHEMPLANT'80 Konferencia, Héviz, 198o.

48 Van der Waerden, B.L.: Mathematical Statistics. Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1969.

49 Wolfe, P.: Econometrica, 27, 382 /1959/.

5o Young, P.C.: Automatica, 6, 271 /197o/.

FÜGGELÉK

F.1 Mátrixok Kronecker-féle szorzása és a *vec*(•) operátor

Legyen $A = \{a_{ij}\}$ egy m•n méretü és B egy s•t méretü mátrix. Akkor a két mátrix $A \otimes B$ Kronecker-féle szorzatán az (m•s)• •(n•t) méretü

$$A \otimes B = \{a_{ij} \cdot B\}$$

hipermátrixot értjük, ahol $a_{ij} \cdot B$ a B mátrix a_{ij} skalárszorosát jelenti.

Jelöljük a_j-vel A mátrix j. oszlopát:

$$A = (a_1, a_2, \ldots, a_n) \quad .$$

Neudecker [32] jelölésével legyen

$$vec(A) = \begin{pmatrix} a_1 \\ \hline a_2 \\ \hline \vdots \\ a_n \end{pmatrix} ,$$

tehát *vec*(A) az A mátrix oszlopainak egymás alá irásával képzett n•m elemü oszlopvektort jelenti.

A definicióból következik, hogy ha **a** oszlopvektor, akkor

$$a = vec(a) = vec(a')$$

A továbbiakban alkalmazni fogjuk a *vec*(•) transzformációt mátrixok szorzatára. Belátható, hogy

$$vec(ABC) = (C' \otimes A) \cdot vec(B)$$

és

$$vec(AB) = (I \otimes A) \cdot vec(B) = (B' \otimes I) \cdot vec(A) = (B' \otimes A) \cdot vec(I) \quad .$$

A definicióból következően *vec*(•) lineáris transzformáció, azaz tetszőleges skalár c_1 és c_2-vel, tetszőleges azonos méretü A_1 és A_2 mátrixszal

$$vec(c_1A_1+c_2A_2) = c_1vec(A_1)+c_2vec(A_2) \quad .$$

A transzformáció rögzitett méretü mátrixokra értelmezve kölcsönösen egyértelmü leképezés.

F.2 A (2.1o) összefüggésben szereplő V_R mátrix

A feladat a (2.8) szerinti

$$\Delta m = (\Delta R' - \Delta R)1$$

összefüggés átalakitása a (2.1o) szerinti

$$V_r \Delta v_R = 0$$

alakra, ahol az állandókat V_R, a változókat Δv_R tartalmazza. Mivel Δm oszlopvektor,

$$\Delta m = vec(\Delta m) = vec((\Delta R' - \Delta R)1) \quad .$$

A transzponált mátrix $vec(\cdot)$ alakja az eredeti mátrix $vec(\cdot)$ alakjából egy **T** permutáló mátrixszal való szorzással adódik. 4·4-es mátrix esetében pl.

$$T = \left[\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc}
1 & & & & & & & & & & & & & & & \\
 & & & & 1 & & & & & & & & & & & \\
 & & & & & & & & 1 & & & & & & & \\
 & & & & & & & & & & & & 1 & & & \\
\hline
 & 1 & & & & & & & & & & & & & & \\
 & & & & & 1 & & & & & & & & & & \\
 & & & & & & & & & 1 & & & & & & \\
 & & & & & & & & & & & & & 1 & & \\
\hline
 & & 1 & & & & & & & & & & & & & \\
 & & & & & & 1 & & & & & & & & & \\
 & & & & & & & & & & 1 & & & & & \\
 & & & & & & & & & & & & & & 1 & \\
\hline
 & & & 1 & & & & & & & & & & & & \\
 & & & & & & & 1 & & & & & & & & \\
 & & & & & & & & & & & 1 & & & & \\
 & & & & & & & & & & & & & & & 1
\end{array}\right]$$

Ezzel

$$vec(\Delta R') = T \cdot vec(\Delta R) \quad .$$

Ezt és a mátrixszorzatok $vec(\cdot)$ transzformációjára vonatkozó összefüggést (2.8)-ra alkalmazva

$$0 = \Delta m - (1' \otimes I) \cdot vec(\Delta R' - \Delta R) = \Delta m - (1' \otimes I)(T \cdot vec(\Delta R) - vec(\Delta R)) =$$

$$= (1' \otimes I)(I - T) \cdot vec(\Delta R) + \Delta m$$

következik.

A

$$\Delta v_R = \begin{pmatrix} vec(\Delta R) \\ \text{-------} \\ \Delta m \end{pmatrix}$$

és

$$V_R = ((1'\boxtimes I)(I-T) \,\vdots\, I) \quad .$$

jelöléssel tehát a (2.1o) összefüggés adódik:

$$V_R \Delta v_R = 0$$

Pl. az $n(I) = 4$ esetben az

(I-T):

	1			-1											
		1						-1							
			1									-1			
	-1			1											
						1			-1						
							1						-1		
		-1						1							
						-1			1						
										1				-1	
			-1									1			
							-1						1		
											-1			1	

(1'⊠I) :

1				1				1				1					-1	-1	-1	1				1				1			
	1				1				1				1				1			-1		-1	-1		1				1		
		1				1				1				1				1				1		-1	-1		-1			1	
			1				1				1				1				1				1				1	-1	-1	-1	

séma szerint

V_R =

	-1	-1	-1	1				1				1				1			
	1			-1		-1	-1		1				1				1		
		1				1		-1	-1		-1			1				1	
			1				1				1	-1	-1	-1					1

Mivel V_R sorainak száma kisebb oszlopai számánál és van egységmátrix oszlopminora, következik, hogy rangja a sorok számával egyenlő, tehát

$$r(V_R) = n(I) \quad .$$

F.3 A (2.11) összefüggésben szereplő V_σ mátrix

A feladat a (2.9) szerinti

$$\Delta m = \Delta S \cdot 1$$

összefüggés átalakitása a (2.11) szerinti

$$V_\sigma \Delta v_\sigma = 0$$

alakra, ahol V_σ a rendszerre jellemző állandó mátrix és Δv_σ a mérlegváltozók vektora.

A (2.9) összefüggés szerint

$$\Delta m = \Delta S \cdot 1$$

és

$$\Delta S = -\Delta S' \quad .$$

A második egyenlet értelmében ΔS antiszimmetrikus, tehát elemei közül csak $n(\sigma) = n(I) \cdot (n(I)-1)/2$ független. Legyenek ezek a főátló alatti elemek:

$$\Delta\sigma = (\Delta s_{21}, \Delta s_{31}, \ldots, \Delta s_{ni,1}, \Delta s_{32}, \ldots, \Delta s_{ni,2}, \ldots, \Delta s_{ni,ni-1})'$$

Nyilvánvalóan létezik olyan $n(I)^2$ sorból és $n(\sigma)$ oszlopból álló mátrix, amivel $\Delta\sigma$-t szorozva $vec(\Delta S)$-et kapjuk. Jelöljük ezt Γ-val. Pl., ha ΔS 4·4 méretü,

$$\Gamma = \left[\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|}
 & & & & & \\
1 & & & & & \\
 & 1 & & & & \\
 & & 1 & & & \\
-1 & & & & & \\
 & & & & & \\
 & & & 1 & & \\
 & & & & 1 & \\
 & -1 & & & & \\
 & & & -1 & & \\
 & & & & & \\
 & & & & & 1 \\
 & & -1 & & & \\
 & & & & -1 & \\
 & & & & & -1 \\
 & & & & &
\end{array}\right]$$

Ezzel tehát

$$vec(\Delta S) = \Gamma\cdot\Delta\sigma$$

és fennáll a

$$T\cdot\Gamma = -\Gamma$$

összefüggés. Ebből következik, hogy

$$-vec(\Delta S') = -T\ vec(\Delta S) = -T\cdot\Gamma\cdot\Delta\sigma = \Gamma\Delta\sigma = vec(\Delta S)$$

Az igy előállitott ΔS tehát tetszőleges $\Delta\sigma$-val kielégiti a $\Delta S = -\Delta S'$ feltételt.
A kiindulási összefüggésre alkalmazva a $vec(\cdot)$ transzformációt

$$\Delta m = vec(\Delta m) = vec(\Delta S\cdot 1) = (1'\otimes I)vec(\Delta S) = (1'\otimes I)\cdot\Gamma\Delta\sigma \quad .$$

Igy

$$-(1'\otimes I)\cdot\Gamma\Delta\sigma+\Delta m = 0 \quad .$$

Vezessük be a

$$C_\sigma = -(1'\otimes I)\cdot\Gamma$$

jelölést. Igy a

$$\Delta v_\sigma = \begin{pmatrix} \Delta\sigma \\ \hline \Delta m \end{pmatrix}$$

és

$$V_\sigma = (C_\sigma \mid I)$$

jelöléssel a (2.11) összefüggés adódik:

$$V_\sigma\cdot\Delta v_\sigma = 0 \quad .$$

Az $n(I) = 4$ esetben a

$$\underline{\underline{\Gamma}}: \quad \left[\begin{array}{cccccc}
 & & & & & \\
1 & & & & & \\
 & 1 & & & & \\
 & & 1 & & & \\
\hline
-1 & & & & & \\
 & & & & & \\
 & & & 1 & & \\
 & & & & 1 & \\
\hline
 & -1 & & & & \\
 & & & -1 & & \\
 & & & & & \\
 & & & & & 1 \\
\hline
 & & -1 & & & \\
 & & & & -1 & \\
 & & & & & -1 \\
 & & & & &
\end{array}\right]$$

$$(\underline{\underline{1}}' \otimes \underline{\underline{\Gamma}}): \quad \left[\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc|cccccc}
1 & & & & 1 & & & & 1 & & & & 1 & & & & -1 & -1 & -1 & & & \\
 & 1 & & & & 1 & & & & 1 & & & & 1 & & & 1 & & & -1 & -1 & \\
 & & 1 & & & & 1 & & & & 1 & & & & 1 & & & 1 & & 1 & & -1 \\
 & & & 1 & & & & 1 & & & & 1 & & & & 1 & & & 1 & & 1 & 1
\end{array}\right]$$

séma szerint

$$\underline{\underline{C}}_{\sigma} = \left[\begin{array}{cccccc}
1 & 1 & 1 & & & \\
-1 & & & 1 & 1 & \\
 & -1 & & -1 & & 1 \\
 & & -1 & & -1 & -1
\end{array}\right]$$

és

$$\underline{\underline{V}}_{\sigma} = \left[\begin{array}{cccccc|cccc}
1 & 1 & 1 & & & & 1 & & & \\
-1 & & & 1 & 1 & & & 1 & & \\
 & -1 & & -1 & & 1 & & & 1 & \\
 & & -1 & & -1 & -1 & & & & 1
\end{array}\right]$$

Mivel V_{σ} sorainak száma kisebb oszlopai számánál és van egységmátrix oszlopminora, következik, hogy rangja a sorok számával egyenlő, tehát

$$r(V_{\sigma}) = n(I) \quad .$$

F.4 A (2.16) összefüggésben szereplő V_K mátrix

A feladat a (2.15) szerinti

$$C_\sigma \cdot \Delta\Sigma + \Delta Z \cdot N = \Delta M$$

összefüggés átalakitása a (2.16) szerinti

$$V_K \cdot \Delta v_K = O$$

alakra, ahol V_K a rendszerre jellemző állandó mátrix, és Δv_K a mérlegváltozók vektora.

Alkalmazzuk a *vec*(·) transzformációt:

$$vec(C_\sigma \cdot \Delta\Sigma) + vec(\Delta Z \cdot N) = vec(\Delta M) \quad .$$

A szorzatokat ugy bontjuk fel, hogy a változók alakuljanak vektorrá:

$$(I_{n(K)} \otimes C_\sigma) \cdot vec(\Delta\Sigma) + (N' \otimes I_{n(I)}) \cdot vec(Z) =$$

$$= I_{n(K) \cdot n(I)} \cdot vec(\Delta M) \quad .$$

Látható, hogy a

$$V_K = (-I_{n(K)} \otimes C_\sigma \;\vert\; -N' \otimes I_{n(I)} \;\vert\; I_{n(I) \cdot n(K)})$$

és

$$v_K = \begin{pmatrix} vec(\Sigma) \\ vec(Z) \\ vec(\Delta M) \end{pmatrix}$$

jelöléssel a (2.16) összefüggést nyerjük:

$$V_K \cdot \Delta v_K = O \quad .$$

Könnyen belátható, hogy V_K rangja

$$r(V_K) = n(I) \cdot n(K) \quad ,$$

v_K elemeinek száma pedig

$$n(v_K) = n(I)\ [n(K)\cdot \frac{n(I)+1}{2} + n(L)] \quad .$$

Pl., ha $n(I) = 4$, $n(L) = 2$ és $n(K) = 3$, akkor, felhasználva C_σ-t az F.3 függelékből,

$$\underline{\underline{V}}_K = \left[\begin{array}{cccccc|cccccc|cccccc|cccc|cccc|cccccccccccc}
1&1&1&&&&&&&&&&&&&&&&\nu_{11}&&&&\nu_{21}&&&&1&&&&&&&&&&&\\
-1&&&1&1&&&&&&&&&&&&&&&\nu_{11}&&&&\nu_{21}&&&&1&&&&&&&&&&\\
&-1&&-1&&1&&&&&&&&&&&&&&&\nu_{11}&&&&\nu_{21}&&&&1&&&&&&&&&\\
&&-1&&-1&-1&&&&&&&&&&&&&&&&\nu_{11}&&&&\nu_{21}&&&&1&&&&&&&&\\ \hline
&&&&&&1&1&1&&&&&&&&&&\nu_{12}&&&&\nu_{22}&&&&&&&&1&&&&&&&\\
&&&&&&-1&&&1&1&&&&&&&&&\nu_{12}&&&&\nu_{22}&&&&&&&&1&&&&&&\\
&&&&&&&-1&&-1&&1&&&&&&&&&\nu_{12}&&&&\nu_{22}&&&&&&&&1&&&&&\\
&&&&&&&&-1&&-1&-1&&&&&&&&&&\nu_{12}&&&&\nu_{22}&&&&&&&&1&&&&\\ \hline
&&&&&&&&&&&&1&1&1&&&&\nu_{13}&&&&\nu_{23}&&&&&&&&&&&&1&&&\\
&&&&&&&&&&&&-1&&&1&1&&&\nu_{13}&&&&\nu_{23}&&&&&&&&&&&&1&&\\
&&&&&&&&&&&&&-1&&-1&&1&&&\nu_{13}&&&&\nu_{23}&&&&&&&&&&&&1&\\
&&&&&&&&&&&&&&-1&&-1&-1&&&&\nu_{13}&&&&\nu_{23}&&&&&&&&&&&&1
\end{array}\right]$$

és

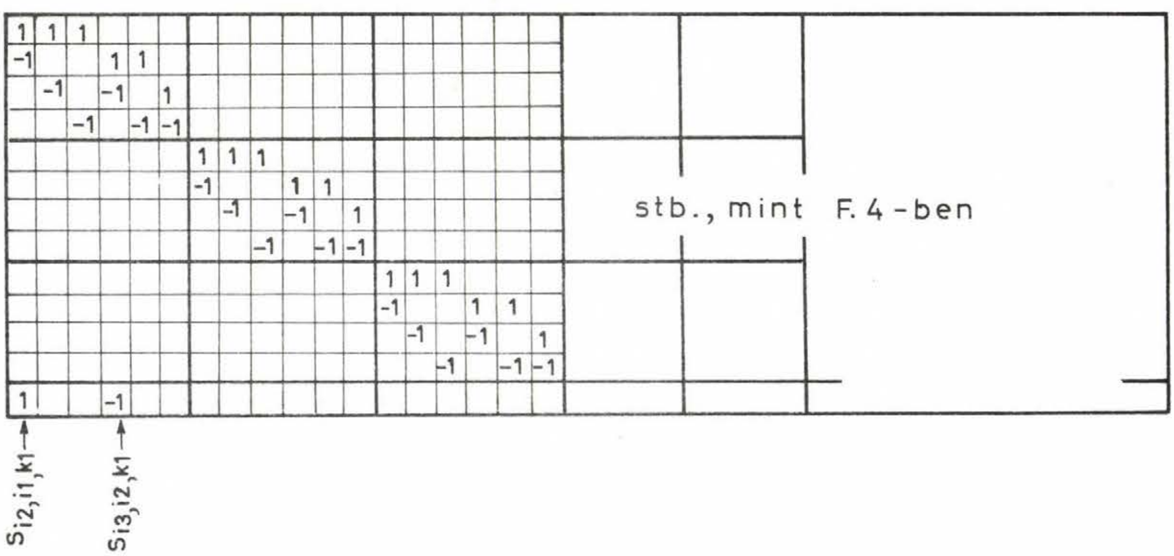
$$\Delta v_k = (\Delta s_{211}, \Delta s_{311}, \Delta s_{411}, \Delta s_{321}, \Delta s_{421}, \Delta s_{431}, \Delta s_{212}, \Delta s_{312}, \Delta s_{412}, \Delta s_{322}, \Delta s_{422}, \Delta s_{432}, \Delta s_{213}, \Delta s_{313}, \Delta s_{413}, \Delta s_{323}, \Delta s_{423}, \Delta s_{433}, \Delta z_{11}, \Delta z_{21}, \Delta z_{31}, \Delta z_{41}, \Delta z_{12}, \Delta z_{22}, \Delta z_{32}, \Delta z_{42}, \Delta m_{11}, \Delta m_{21}, \Delta m_{31}, \Delta m_{41}, \Delta m_{12}, \Delta m_{22}, \Delta m_{32}, \Delta m_{42}, \Delta m_{13}, \Delta m_{23}, \Delta m_{33}, \Delta m_{43})'$$

F.5 Két példa a mérlegegyenletek kiegészitő feltételeire

a/ Két komponensáram egyenlőségének előirása

Tekintsük az F.5.1 ábra szerinti négyelemü rendszert három komponenssel /a komponensátalakulásokkal most nem foglalkozunk/. A rendszer elemeinek halmaza $I = \{i1, i2, i3, i4\}$; a komponensek halmaza $K = \{k1, k2, k3\}$. $i1$-et tekintjük a rendszer környezetének. Legyen az $i2$ részrendszer egy szeparátor, amely a $k1$ komponenst teljes egészében eltávolitja az $i1$-ből jövő áramból és azt maradéktalanul az $i3$ részrendszer felé továbbitja. A többi komponens árama megoszlik az $i3$ és $i4$ részrendszerek felé irányuló áramok között. $i3$ és $i4$ között közvetlen komponensátmenet nincsen.

Ennek megfelelően $s_{i4,i3,k} = 0$ valamennyi $k \in K$-re. A mérlegegyenletek rendszerét ki kivánjuk egésziteni az $s_{i2,i1,k1} = s_{i3,i2,k1}$ előirással. A mérlegegyenletek F.4 szerinti együtthatómátrixát és természetesen jobboldalát is kibővitjük egy sorral:



A feltétel bevezetése a változók számát nem növeli.

Példánkban a két komponensáram egyenlővé tehető volna az $s_{i4,i2,k1} = 0$ értékadással is. Bonyolultabb esetekben azonban /pl. kettőnél többfelé való elágazás/ az itt ismertetett eljárás egyszerübb és áttekinthetőbb lehet.

b/ Rögzitett összetételü áram

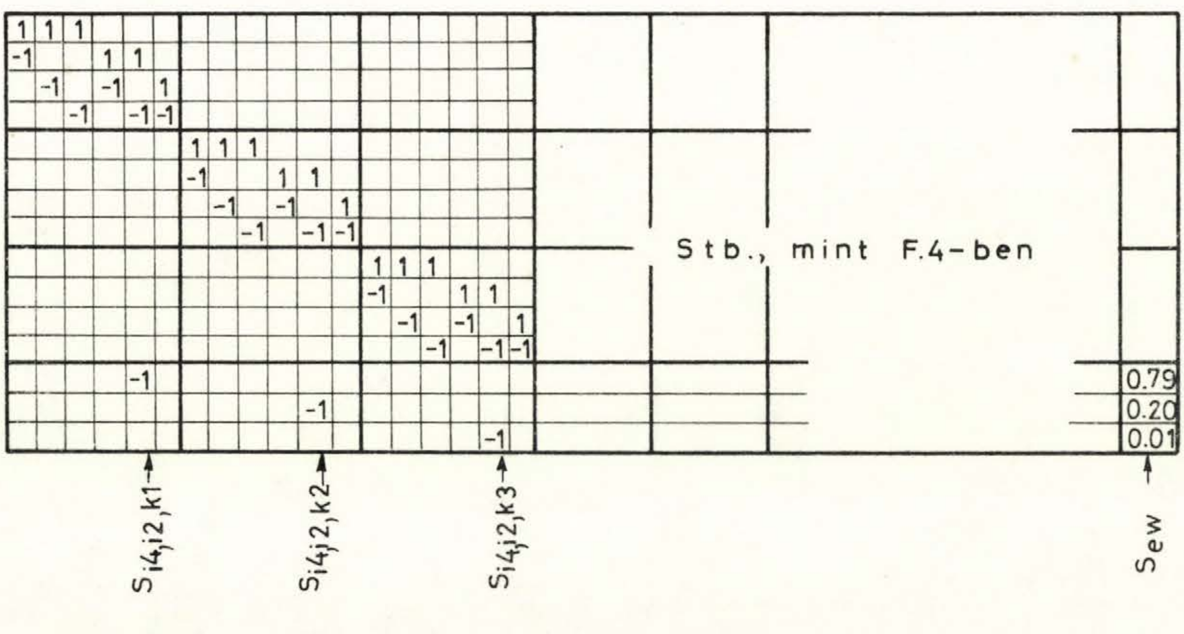
Tekintsük az F.5.2 ábra szerinti négyelemü rendszert három komponenssel /a komponensátalakulásokkal példánkban nem foglalkozunk/. A rendszer elemeinek halmaza $I = \{i1, i2, i3, i4\}$; a komponensek halmaza $K = \{k1, k2, k3\}$. Legyen $i1$ a rendszer környezete, $i2$ egy levegőkompresszor, $i3$ egy gázkompresszor, $i4$ egy gázégő, $i2$ és $i3$ között közvetlen komponensátmenet nincs.

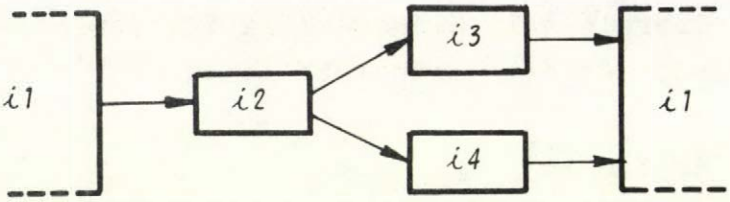
Ennek megfelelően $s_{i3,i2,k} = 0$ valamennyi $k \in K$-ra. Legyen $k1 = N_2 + A$, $k2 = O_2$, $k3 = CO_2$. /Példánkban a vizgőztartalmat figyelmen kivül hagyjuk./ Azt, hogy az $i2$-ből $i4$-be menő áram levegő, a következőképpen specifikáljuk:

Bevezetünk egy uj változót, az $i2$-ből $i4$-be menő összes komponensátmenetet /összes belépő levegő/. Jelöljük ezt s_{lev}-vel. Ezt felhasználva fennállnak az

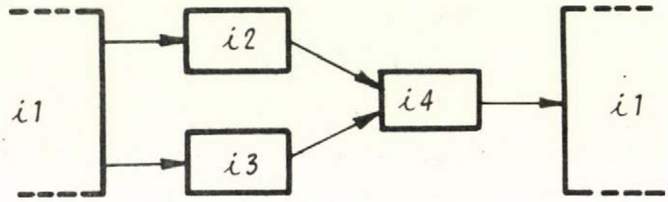
$$s_{i4,i2,k1} = 0.79\ s_{lev}$$
$$s_{i4,i2,k2} = 0.20\ s_{lev}$$
$$s_{i4,i2,k3} = 0.01\ s_{lev}$$

feltételi egyenletek. Ennek megfelelően a kibővitett egyenletrendszer együtthatómátrixa:





F.5.1 ábra



F.5.2 ábra

F.6 A normált változók invariancia tulajdonságai

a/ A 3.2.2 részben bevezetett normált változók abszolut értéke invariáns az eredeti változók kölcsönösen egyértelmü lineáris transzformációjára nézve.

Legyen d^*, x^* és c^* a d, x és c változók kölcsönösen egyértelmü homogén lineáris transzformáltja /azaz transzformált koordinátarendszerbeli képe/:

$$d^* = Sd, \qquad x^* = Sx, \qquad c^* = Sc$$

ahol S egy tetszőleges kvadratikus nem szinguláris mátrix.

Nyilvánvalóan, ha $E(\tilde{d}) = 0$, akkor

$$E(\tilde{d}^*) = E(S\tilde{d}) = 0$$

és

$$V_{\tilde{d}}^* = E(\tilde{d}^*\tilde{d}^{*\prime}) = SE(\tilde{d}\tilde{d}')S' = SV_{\tilde{d}}S' \quad .$$

Képezzük d^*-ból a normált δ^* változót (3.15)-nek megfelelően:

$$\delta^* = V_{\tilde{d}^*}^{-1/2} d^* = (SV_{\tilde{d}}S')^{-1/2} Sd \quad .$$

Beláthatjuk, hogy a δ^* normált hivavektor abszolut értéke S-től független. Az abszolut érték négyzete ui.:

$$\delta^{*\prime}\delta^* = d'S'(SV_{\tilde{d}}S')^{-1}Sd = d'V_{\tilde{d}}^{-1}d = \delta'\delta \quad .$$

Hasonló módon látható be az analóg állitás ξ^*-ra és γ^*-ra is.

b/ A φ normált mérleghiba vektor abszolut értéke invariáns a mérlegegyenletek kölcsönösen egyértelmü transzformációjára nézve.

Tekintsük a feltételi egyenletnek egy, az eredetivel ekvivalens, lineárisan transzformált alakját:

$$A^*d = f^*$$

ahol

$$A^* = QA$$

és

$$f^* = Qf \quad ,$$

közös kvadratikus, nemszinguláris Q-val.

Belátható, hogy a (3.19)-ből számitott φ^* normált mérleghiba vektor abszolut értéke Q-tól független. Képezzük A^*-ból G^*-ot (3.12)-nek megfelelően:

$$G^* = (A^* V_{\tilde{d}} A^{*\prime})^{-1/2} A^* V_{\tilde{d}}^{1/2} = (QAV_{\tilde{d}} A'Q')^{-1/2} QAV_{\tilde{d}}^{1/2} \quad .$$

Ezzel a mérleghiba vektor abszolut értékének négyzete (3.19) szerint

$$\varphi^{*\prime}\varphi^* = \delta' V_{\tilde{d}}^{1/2} A'Q'(QAV_{\tilde{d}} A'Q')^{-1} QAV_{\tilde{d}}^{1/2}\delta = \delta' V_{\tilde{d}}^{1/2} A'(AV_{\tilde{d}} A')^{-1} AV_{\tilde{d}}^{1/2}\delta =$$

$$= \varphi'\varphi \quad .$$

Ebből következik, hogy $|\varphi|$ Q-tól független. Az a/ szerinti transzformációtól való függetlenség triviális.

F.7 Szimmetrikus, pozitiv definit mátrix négyzetgyökének iterációs számitása

Legyenek **A** és X_o hasonló*, valós, szimmetrikus, pozitiv definit mátrixok és legyen

$$X_{k+1} = \frac{1}{2}(AX_k^{-1}+X_k) \quad , \qquad (F.7.1)$$

akkor

$$\lim_{k\to\infty} X_k = A^{1/2} \quad . \qquad (F.7.2)$$

Pozitiv definit diaginálmátrixokra ui. triviálisan alkalmazható a pozitiv valós számok négyzatgyökének iterációs számitására ismert összefüggés: ha

$$\Lambda_{k+1} = \frac{1}{2}(M\Lambda_k^{-1}+\Lambda_k) \quad , \qquad (F.7.3)$$

akkor

$$\lim_{k\to\infty} \Lambda_k = M^{1/2} \qquad (F.7.4)$$

feltéve, hogy $M^{1/2}$ valós és Λ_k^{-1} létezik.

Ha **M**, ill. Λ_o speciálisan az **A**, ill. X_o sajátértékeiből képzett diagonálmátrix, amelyekre tehát

$$A = EME'$$

$$X_o = E\Lambda_o E'$$

és

$$E'E = EE' = I \quad ,$$

akkor (F.7.3) és (F.7.4)-ből következik, hogy

---

* Hasonló mátrixok sajátvektorrendszere azonos.

$$X_{k+1} = E\Lambda_{k+1}E' = \frac{1}{2}E(M\Lambda_k^{-1}+\Lambda_k)E' =$$

$$= \frac{1}{2}(EME'E\Lambda_k^{-1}E'+E\Lambda_kE') = \frac{1}{2}(A\cdot X_k^{-1}+X_k) \qquad (F.7.7)$$

és

$$\lim_{k\to\infty} X_k = \lim_{k\to\infty} E\Lambda_kE' = E\cdot\lim_{k\to\infty} \Lambda_kE' = EM^{1/2}E' = A^{1/2} \quad . \qquad (F.7.8)$$

A hasonlóság biztositása céljából célszerü X_o-t A-nak választani.

(F.7.3), (F.7.4)-ből következően nyilvánvaló, hogy az algoritmus a csupa pozitiv sajátértékü négyzetgyököt szolgáltatja.

F.8 A mérési hibák 0 várható értékének tesztje

(Krámli András)

Feladatunk annak eldöntése, hogy fenntartható-e az a hipotézis, hogy a mérési hibák, mint adott varianciamátrixu normális eloszlásu vektorváltozók 0 várható értéküek-e, vagy sem. Az alábbiakban bemutatjuk, hogy az értekezés 3.2.3 pontjában javasolt hipotézisvizsgálat a matematikai statisztika szóhasználata szerint megengedhető /admissible/. Ez a próba egyuttal egyenletesen legerősebb /most powerful/ annak a H_o hipotézisnek a vizsgálatára, hogy a q^2 ν szabadsági foku χ^2 eloszlásu valószinüségi változó centrális-e. Válasszuk ellenhipotézisnek (H') azt a feltevést, hogy q^2 nem centrális χ^2 eloszlásu, ahol α a nem centráltságra jellemző egyetlen paraméter, vagyis a q^2 összeget alkotó független normális eloszlásu valószinüségi vektorváltozó várható érték vektorának abszolut értéke.

Minthogy az α paraméterü nem centrális χ^2 eloszlás sürüségfüggvénye

$$h(z,\alpha) = \frac{exp(-1/2(z+\alpha))z^{1/2(\nu-2)}}{2^{1/2}\Gamma\{1/2(\nu-1)\}\Gamma(1/2)} \cdot$$

$$\cdot \sum_{r=0}^{\infty} \frac{\alpha^r z^r}{2r!} B\left\{\frac{1}{2}(\nu-1),\frac{1}{2}+r\right\}$$

alaku /lásd pl. [25]/, a $\frac{h(z,\alpha)}{h(z,0)}$ likelihood hányados z-nek pozitiv együtthatóju hatványsora. Ezért adott valószinüségü elsőfaju hiba esetén α minden értékére a másodfaju hibát minimalizáló W elfogadási tartomány /q^2 azon értékeinek halmaza, amelyre a H_o hipotézist elfogadjuk/ - amely a Neyman-Pearson lemma értelmében a $\frac{h(z,\alpha)}{h(z,0)}$ függvény valamely nivó halmaza - a pozitiv féltengelynek a 0 pontot tartalmazó intervalluma. Igy a $q^2 < \alpha$ próba a $H'(0<\alpha<\infty)$ ellenhipotézisseregre <u>egyenletesen legerősebb</u>.

Az $(x_1,\dots,x_\nu)'$ vektorváltozó által hordozott információnak a

$$q^2 = \sum_{i=1}^{\nu} x_i^2$$

skalár mennyiségbe való összesüritését az alábbi állitás is alátámasztja. Jelölje $P_H(\cdot)$ a H hipotézis szerinti valószinüséget. Adott $1-P_{H_o}(W_o)$ elsőfoku hiba esetén a $W_o = \{\mathbf{x}: q^2 \leq \alpha\}$ hipergömbalaku elfogadási tartományon alapuló hipotézisvizsgálat <u>megengedhető</u>, azaz nincs olyan $W_1 \neq W_o$ elfogadási tartomány, amelyre

$$P_{H_o}(W_1) = P_{H_o}(W_o) \tag{F.8.1}$$

és

$$P_{H_1}(W_1) < P_{H_1}(W_o) \tag{F.8.2}$$

valamennyi lehetséges H_1 ellenhipotézisre.

A bizonyitás indirekt módon végezhető el: az (F.8.1) egyenlőségből és $W_1 \neq W_o$-ból következik, hogy W_1-nek van a $q^2 \leq \alpha$ gömb valamelyik érintő hipersikjának a gömbbel ellentétes oldalán lévő nem 0 valószinüségü $W_2 \subseteq W_1$ részhalmaza. /A valószinüséget vehetjük a H_o hipotézis szerint vagy bármilyen H_1 ellenhipotézis szerint./

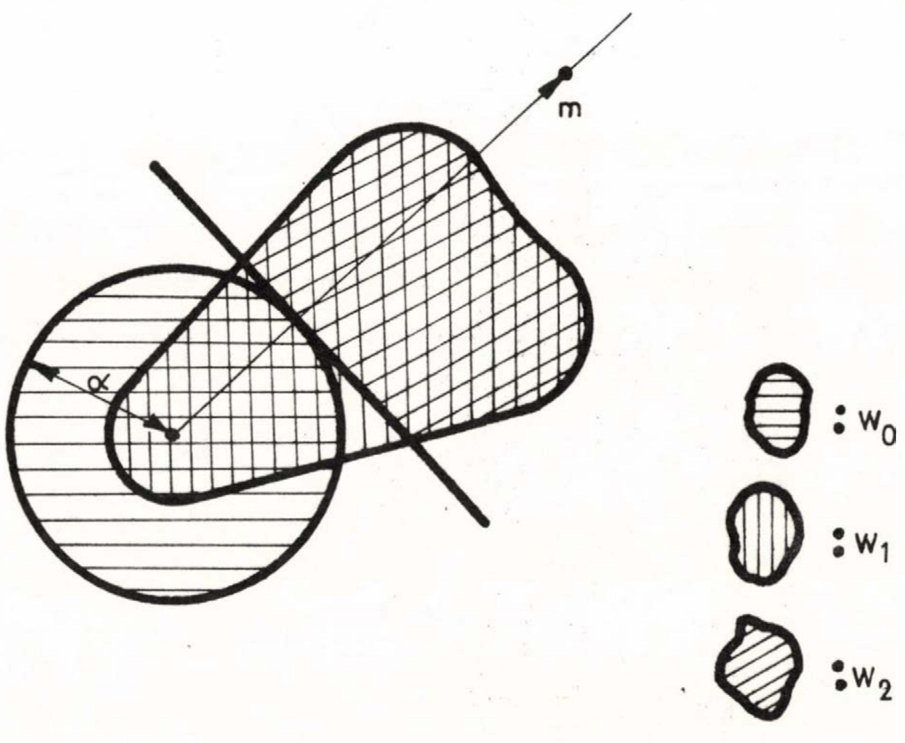
Az e^{-x^2} függvény azon tulajdonságából, hogy tetszőleges $\varepsilon > 0$-ra

$$\lim_{m\to\infty} \frac{e^{-(m+\varepsilon)^2}}{e^{-m^2}} = 0 \quad ,$$

következik, hogy alkalmasan választott H_1-re

$$P_{H_1}(W_1) \geq P_{H_1}(W_2) > P_{H_1}(W_o) \quad .$$

Ez az egyenlőtlenség pedig ellentmond az F.8.2 egyenlőtlenségnek. A H_1-et ugy kell megválasztani, hogy a hozzátartozó m várhatóérték vektor az origóból kiinduló és bármelyik a W_2 halmazon áthaladó félegyenes egy elegendően távoli pontja legyen /lásd az F.8.1 ábrát/.



F.8.1 ábra

F.9 A korrekció feltételes LKN becslése és az abból számitott mennyiségek

a/

Adott (3.36) szerint a minimálandó

$$\Psi(\gamma) = \frac{1}{2}\gamma'\gamma \qquad \text{(F.9.1)}$$

célfüggvény és (3.37) szerint a

$$G\gamma+\tilde{\varphi} = 0 \qquad \text{(F.9.2)}$$

feltételrendszer, ahol G $n(f)\cdot n(x)$ mátrix ($n(f) < n(x)$) és

$$GG' = I \quad . \qquad \text{(F.9.3)}$$

A feltételes minimum helyét a Lagrange multiplikátorok módszerével határozhatjuk meg /lásd az F.14 és F.15 függelékeket/. Képezzük a kibővitett

$$\Psi^*(\gamma,\lambda) = \frac{1}{2}\gamma'\gamma+Tr(\lambda'(G\gamma+\tilde{\varphi})) \qquad \text{(F.9.4)}$$

célfüggvényt. A minimum helynek megfelelő $\hat{\gamma}$-nek ki kell elégitenie a

$$\frac{\partial}{\partial\gamma}\Psi^*(\gamma,\lambda)\Big|_{\substack{\gamma=\hat{\gamma}\\ \lambda=\hat{\lambda}}} = \hat{\gamma}+G'\hat{\lambda} = 0 \qquad \text{(F.9.5)}$$

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}\Psi^*(\gamma,\lambda)\Big|_{\substack{\gamma=\hat{\gamma}\\ \lambda=\hat{\lambda}}} = G\hat{\gamma}+\tilde{\varphi} = 0 \qquad \text{(F.9.6)}$$

mátrixegyenlet rendszert.

(F.9.5)-ből, (F.9.3)-at figyelembe véve

$$\hat{\lambda} = -G\hat{\gamma} \quad , \qquad \text{(F.9.7)}$$

ezt (F.9.6)-ba helyettesitve

$$\hat{\lambda} = \tilde{\varphi} \quad , \qquad \text{(F.9.8)}$$

végül ezt (F.9.5)-be visszahelyettesitve megoldásként

$$\hat{\gamma} = -G'\tilde{\varphi} \qquad (F.9.9)$$

adódik.

A célfüggvény pozitiv definit voltából következik, hogy $\hat{\gamma}$ valóban minimumhely.

b/

A definició szerinti

$$\hat{\xi} = \tilde{\xi}+\hat{\gamma}$$

összefüggésből (F.9.9)-cel

$$\hat{\xi} = \tilde{\xi}-G'\tilde{\varphi} \quad . \qquad (F.9.1o)$$

c/

(3.19)-et figyelembe véve

$$\hat{\gamma} = -G'G\tilde{\delta} \quad . \qquad (F.9.11)$$

d/

Kiindulva a definició szerinti

$$\tilde{\delta} = \tilde{\xi}-\check{\xi} \quad , \quad \hat{\gamma} = \hat{\xi}-\tilde{\xi} \quad \text{és a} \quad \hat{\delta} = \hat{\xi}-\check{\xi}$$

összefüggésekből,nyilvánvaló, hogy

$$\hat{\delta} = \tilde{\delta}+\hat{\gamma}$$

Eszerint tehát (F.9.11)-ből

$$\hat{\delta} = (I-G'G)\tilde{\delta} \quad . \qquad (F.9.12)$$

e/

A definició szerinti

$$\hat{\xi} = \check{\xi}+\hat{\delta}$$

összefüggésnek megfelelően

$$\hat{\xi} = \check{\xi}+(I-G'G)\tilde{\delta} \quad . \tag{F.9.13}$$

f/

(F.9.11)-ből következik

$$E(\tilde{\delta}) = 0$$

-t kihasználva, hogy

$$E(\hat{\gamma}) = 0 \quad .$$

g/

Az előzőkhöz hasonlóan

$$E(\hat{\delta}) = 0 \quad .$$

h/

$\tilde{\delta}$ definiciója értelmében

$$E(\hat{\xi}) = \check{\xi}$$

i/

Figyelembe véve, hogy (3.22) értelmében $V_{\tilde{\delta}} = I$, következik, hogy

$$V_{\hat{\gamma}} = E((\hat{\gamma}-E(\hat{\gamma}))\cdot(\hat{\gamma}-E(\hat{\gamma}))') = E(\hat{\gamma}\hat{\gamma}') = G'G\cdot E(\tilde{\delta}\tilde{\delta}')\cdot G'G = G'G \quad . \tag{F.9.14}$$

j/

Hasonlóképpen

$$V_{\hat{\delta}} = E((\hat{\delta}-E(\hat{\delta})\cdot(\hat{\delta}-E(\hat{\delta}))') = E(\hat{\delta}\hat{\delta}') = (I-G'G)\cdot E(\tilde{\delta}\tilde{\delta}')\cdot(I-G'G) =$$

$$= I-G'G \quad ,$$

másrészt

$$V_{\hat{\xi}} = E((\hat{\xi}-E(\hat{\xi})\cdot(\hat{\xi}-E(\hat{\xi}))') = E((\hat{\xi}-\check{\xi})(\hat{\xi}-\check{\xi})') = E(\hat{\delta}\hat{\delta}') = I-G'G \quad .$$

k/

A közismert

$$E(\hat{\gamma}'\hat{\gamma}) = E(Tr(\hat{\gamma}\hat{\gamma}')) = Tr(E(\hat{\gamma}\hat{\gamma}'))$$

transzformáció után, i/ eredményét felhasználva

$$E(\hat{\gamma}'\hat{\gamma}) = Tr(G'G) \quad .$$

Mivel G´G projektormátrix, és igy nyoma a rangjával egyenlő, és minthogy

$$r(G) = n(f) \quad ,$$

következik, hogy

$$E(\hat{\gamma}'\hat{\gamma}) = n(f) \quad .$$

l/

Az előzőkhöz hasonlóan, figyelembe véve, hogy

$$r(I-G'G) = n(x)-n(f)$$

következik, hogy

$$E(\hat{\delta}'\hat{\delta}) = Tr(E(\hat{\delta}\hat{\delta}')) = Tr(I-G'G) = n(x)-n(f) \quad .$$

F.1o <u>Lineáris feltételrendszert kielégítő modell együtthatóinak meghatározása változók ki- küszöbölésével</u>

Adott az

$$y = Cu+c \qquad (F.1o.1)$$

összefüggés és a

$$Hu+\Gamma y+\zeta = 0 \qquad (F.1o.2)$$

feltételrendszer.

Γ-t felbontjuk egy nem szinguláris kvadratikus és egy maradék oszlopokból álló minorra:

$$\Gamma = (\Gamma_1 \mid \Gamma_2)$$

Ennek megfelelően bontjuk fel y-t, C-t és c-t is:

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \hline y_2 \end{pmatrix} , \quad C = \begin{pmatrix} C_1 \\ \hline C_2 \end{pmatrix} , \quad c = \begin{pmatrix} c_1 \\ \hline c_2 \end{pmatrix} .$$

Az általánosság megsértése nélkül feltételezzük, hogy Γ baloldali kvadratikus minora invertálható. Mivel előzetesen tett feltevésünk értelmében $r(\Gamma)$ egyenlő a feltételi egyenletek számával, ez az oszlopok és ennek megfelelően y, stb. elemeinek alkalmas cseréjével mindig elérhető.

Igy (F.1o.2)-ből y_1 kifejezhető:

$$Hu+\Gamma_1 y_1+\Gamma_2 y_2+\zeta = 0 \quad ,$$

amiből, kihasználva, hogy Γ_1 nem szinguláris,

$$y_1 = -\Gamma_1^{-1}(\Gamma_2 y_2+Hu+\zeta) \qquad (F.1o.3)$$

és igy nyilvánvalóan

$$y = \left(\frac{-\Gamma_1^{-1}H}{O}\right)u + \left(\frac{-\Gamma_1^{-1}\Gamma_2}{I}\right)y_2 + \left(\frac{-\Gamma_1^{-1}\zeta}{O}\right) \quad . \tag{F.1o.4}$$

(F.1o.1)-ből nyilván

$$y_1 = C_1u+c_1 \tag{F.1o.5}$$

és

$$y_2 = C_2u+c_2 \quad . \tag{F.1o.6}$$

Jelentse (F.1o.6) a lineárisan független összefüggéseket, tehát feltételezhetően C_2 és c_2 megfigyelt adatokból meghatározható, pl. a hagyományos LKN módszerrel. Ha C_2-t és c_2-t ismerjük, (F.1o.6)-ot (F.1o.3)-ba helyettesitve számithatjuk y_1-et:

$$y_1 = -\Gamma_1^{-1}((\Gamma_2C_2+H)u+(\Gamma_2c_2+\zeta)) \quad . \tag{F.1o.7}$$

Ezt (F.1o.5)-tel összevetve a jobboldalak minden u-ra egyenlők, tehát külön a szorzófaktor és külön az additiv állandó is egyenlő :

$$C_1 = -\Gamma_1^{-1}(\Gamma_2C_2+H) \quad , \tag{F.1o.8}$$

$$c_1 = -\Gamma_1^{-1}(\Gamma_2c_2+\zeta) \quad , \tag{F.1o.9}$$

és igy

$$C = \left(\frac{-\Gamma_1^{-1}H}{O}\right) + \left(\frac{-\Gamma_1^{-1}\Gamma_2}{I}\right) C_2 \quad , \tag{F.1o.1o}$$

$$c = \left(\frac{-\Gamma_1^{-1}\zeta}{O}\right) + \left(\frac{-\Gamma_1^{-1}\Gamma_2}{I}\right) c_2 \quad . \tag{F.1o.11}$$

Behelyettesitéssel ellenőrizhető, hogy ilyen C és c-vel az (F.1o.2) feltételrendszer minden C_2, c_2 és **u** mellett teljesül.

F.11 Feltételes legkisebb négyzetes együtthatóbecslés

A 4.1.2 pontban megfogalmazott feladat megoldásához a LKN együtthatóbecslés kiterjesztését ismertetjük olyan esetre, amikor a független és a becsült együtthatókkal számitott függő változók között adott lineáris kapcsolatnak kell fennállnia.

Megemlitjük, hogy Asbjørnsen és Hertzberg [6] is leirja egy bizonyos feltételes LKN becslés kémiai alkalmazását. Náluk azonban bizonyos számu rögzitett ponton átmenő megoldást biztositó együtthatómátrix meghatározásáról van szó, ami lényegében különbözik az előzőkben megfogalmazott feladattól.

Két esetet tárgyalunk: az

a/ homogén lineáris,
b/ inhomogén lineáris

függvénykapcsolat együtthatóbecslését. Ezt követően a c/ pontban a becsült együtthatómátrix néhány statisztikai tulajdonságát vizsgáljuk.

Előljáróban megjegyezzük, hogy a rövidség kedvéért a tárgyalásban szereplő mátrixok méreteit definiálásukkor nem adjuk meg, ezek azonban $\mathbf{x}$ és $\mathbf{y}$ méretéből, valamint a feltételi egyenletek és a megfigyelések számából félreérthetelenül adódnak. Ugyancsak nem térünk ki a mátrix inverz képzések elvégezhetőségének feltételeire. Az eredmények csak akkor értelmezhetők, ha valamennyi inverz létezik. Ennek szükséges /de nem elégséges/ feltételei a mátrixok méreteiből nyilvánvalók.

a/

Homogén lineáris függvénykapcsolat

Adott egy homogén lineáris

$$\mathbf{y} = \mathbf{C}\mathbf{x}$$

függvénykapcsolat és egy $\mathbf{C}$-re vonatkozó

$$K+JC = O \qquad (F.11.2)$$

feltétel, ahol x a független, y a függő változók vektora, C ismeretlen, J és K ismert együtthatómátrixok. C becsléséhez összetartozó x és y vektorpároknak, mint megfigyeléseknek egy sokaságával rendelkezünk, ahol az y-ra vonatkozó megfigyelések hibával terheltek. A j-edik megfigyelést x_j, ill. $\tilde{y}_j$-vel jelöljük. Az összes megfigyelésből, mint oszlopvektorokból képezzük az

$$X = (x_1, x_2, \ldots, x_j, \ldots x_m)$$

ill.

$$\tilde{Y} = (\tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \ldots, \tilde{y}_j, \ldots \tilde{y}_m)$$

mátrixokat, ahol m a megfigyelések száma.

Az (F.11.1) összefüggés az X mátrixhoz az

$$Y = CX \qquad (F.11.3)$$

mátrixct rendeli. Keressük X és $\tilde{Y}$ ismeretében a LKN elvének értelmében legjobban illeszkedő $\hat{C}$ együtthatómátrixot azon C-k közül, amelyek kielégitik az (F.11.2) feltételt.

Jelöljük az illeszkedési hibák, azaz a megfigyelt és a becsült együtthatókkal számitott kimenetek különbségének mátrixát E-vel:

$$E = \tilde{Y} - \hat{C}X \qquad (F.11.4)$$

$\hat{C}$ sulyozott szabad LKN becslése az

$$\begin{aligned} \varepsilon^* &= Tr(V^{-1/2}EW^{-1}E'V^{-1/2}) = \\ &= Tr(V^{-1/2}(\tilde{Y}-CX)W^{-1}(\tilde{Y}-CX)'V^{-1/2}) \end{aligned} \qquad (F.11.5)$$

célfüggvény C szerinti minimumhelye, a sulyozott feltételes LKN becslés ugyanezen célfüggvénynek az (F.11.2) feltételt kielégitő minimumhelye. Itt V^{-1} a függő változóvektor elemei szerinti, W^{-1} az egyes megfigyelések időpontja szerinti sulyozás mátrixa. /Megadásukat megkönnyiti az, hogy bizonyos ideális feltételek fennforgása esetén ezek az adott változók inverz varianciamátrixának tekinthetők./

Az igy megfogalmazott feladat megoldása történhet algebrailag - képletszerüen -, vagy bizonyos transzformációk végrehajtása után numerikusan. Ez utóbbit nem vizsgáljuk részletesen, csupán megemlitjük, hogy a Neudecker-féle transzformáció [32] alkalmazása után a keresett $\hat{C}$ együtthatómátrix meghatározása lineáris programozásra [49] is visszavezethető. A módszer előnye, hogy alkalmazása során egyenlőtlenségi feltételek is figyelembe vehetők. Hátránya az algebrai, képletszerü megoldással szemben, hogy nem ad lehetőséget a megoldhatósági feltételektől és a paraméterektől való függés elemzésére. Számitógépes megvalósitása a lineáris algebra szokásos módszereitől eltér és a feladat eredeti méretéhez viszonyitva nagy méretü lineáris programozási feladat megoldását igényli.

Képletszerü megoldáshoz juthatunk a lineáris vektorterek elméletének, vagy a lineáris algebra módszereinek alkalmazásával. Hasonló feladatra skalár függő változóra Rao [33] és Linnik [27] közli a megoldást. Az itt közölt levezetés azokkal lényegében megegyezik, vektor függő változóra általánositva.

A levezetésünkben a lineáris algebra két kevéssé ismert müveletét használjuk: a skalár—mátrix függvények mátrix szerinti deriválását és a mátrix Lagrange-multiplikátorok alkalmazását mátrix szerinti feltételes szélsőérték számitás során. Az itt és az F.12 függelékben közölt gondolatmenet követésének megkönnyitése érdekében ezeket a fogalmakat és müveleteket külön ismertetjük: az előbbit F.14-ben, az utóbbit az F.15 függelékben.

Az (F.11.2) feltételt kielégitő szélsőérték helyét a Lagrange-multiplikátorok módszerével határozzuk meg. A kibővitett célfüggvény

$$\varepsilon = Tr(V^{-1/2}(\tilde{Y}-CX)W^{-1}(\tilde{Y}-CX)'V^{-1/2})+Tr(L'(JC+K)) \qquad (F.11.6)$$

ahol L a Lagrange-multiplikátorok K-val azonos méretü mátrixa.

Mivel ε^* pozitiv definit, a minimumhely létezik és ott a C és L szerinti parciális deriváltak zérusok:

$$\left.\frac{\partial\varepsilon}{\partial C}\right|_{\substack{C=\hat{C}\\ L=\hat{L}}} = 2V^{-1}\hat{C}XW^{-1}X'-2V^{-1}\tilde{Y}W^{-1}X'+J'\hat{L} = 0 \qquad (F.11.7)$$

$$\left.\frac{\partial\varepsilon}{\partial L}\right|_{\substack{C=\hat{C}\\ L=\hat{L}}} = J\hat{C}+K = 0 \qquad (F.11.8)$$

(F.11.7)-et balról $(JVJ')^{-1}JV$-vel szorozva kapjuk $\hat{L}$-t:

$$\hat{L} = 2(JVJ')^{-1}J(\tilde{Y}-\hat{C}X)W^{-1}X' \qquad (F.11.9)$$

(F.11.8)-at felhasználva

$$\hat{L} = 2(JVJ')^{-1}(J\tilde{Y}+KX)W^{-1}X' \quad . \qquad (F.11.1o)$$

Ezt (F.11.7)-be visszahelyettesitve és átrendezve nyerjük a keresett $\hat{C}$ együtthatómátrixot:

$$\hat{C} = \tilde{Y}W^{-1}X'(XW^{-1}X')^{-1}-VJ'(JVJ')^{-1}(J\tilde{Y}+KX)W^{-1}X'(XW^{-1}X')^{-1} \; . \qquad (F.11.11)$$

A szabad - feltétel nélküli - LKN közelitéssel adódó együtthatót jelöljük C_f-fel. Ez közismerten

$$\boxed{C_f = \tilde{Y}W^{-1}X'(XW^{-1}X')^{-1}} \; . \qquad (F.11.12)$$

Ezzel (F.11.11) egyszerübben felirható:

$\hat{C} = C_f-VJ'(JVJ')^{-1}JC_f-VJ'(JVJ')^{-1}KXW^{-1}X'(XW^{-1}X')^{-1}$-ből végeredményképpen

$$\boxed{\hat{C} = C_f - VJ'(JVJ')^{-1}(K+JC_f)} \qquad (F.11.13)$$

A feltételrendszert kielégitő $\hat{C}$ megoldás tehát a szabad LKN becsléssel nyert C_f együtthatónak és egy korrekciós tagnak az összege. Ez utóbbi lineárisan függ a feltételrendszer teljesülésének hibájától. Az összefüggést

$$\hat{C} = (I-VJ'(JVJ')^{-1}J)C_f - VJ'(JVJ')^{-1}K \qquad (F.11.14)$$

alakra hozva megállapitható, hogy $\hat{C}$-t valójában $V^{-1/2}C_f$-nek egy $JV^{1/2}$-re ortogonális lineáris alakzatra való vetitésével kapjuk.

(F.11.11) kiszámitásának másik módja, hogy első lépésként $\tilde{Y}$-ot transzformáljuk az

$$\hat{\tilde{Y}} = (I-VJ'(JVJ')^{-1}J)\tilde{Y} - VJ'(JVJ')^{-1}KX \qquad (F.11.15)$$

transzformációs formula szerint, majd erre alkalmazzuk, mint megfigyelt függő változó mátrixra, a szabad LKN közelitést. Igy (F.11.11) szerint

$$\hat{\tilde{Y}}W^{-1}X'(XW^{-1}X')^{-1} =$$

$$= \tilde{Y}W^{-1}X'(XW^{-1}X')^{-1} - VJ'(JVJ')^{-1}(KX+J\tilde{Y})\cdot W^{-1}X'(XW^{-1}X')^{-1} = \hat{C} \qquad (F.11.16)$$

tehát az utóbbi módon becsült együtthatómátrix azonos a feltételes becslés eredményével.

Az (F.11.15) transzformáció geometriailag $V^{-1/2}\tilde{Y}$-nak egy $JV^{1/2}$-re ortogonális lineáris alakzatra való vetitését jelenti.

A két megoldási ut tehát a vetités és a becslés sorrendjének sorrendjében különbözik. Müveletigényességüknek összehasonlitása csak a konkrét mátrixméretek ismeretében lehetséges.

b/

Inhomogén lineáris függvénykapcsolat

Az értekezés 4.1 részfejezete szerint adott a (4.1) összefüggésnek megfelelő matematikai modell az

$$y^* = B^*u^*+b^* \tag{F.11.17}$$

függvénykapcsolat alakjában, általunk ismeretlen B^*-gal és b^*-gal és fennáll a (4.2) összefüggésnek megfelelő

$$H^*u^*+G^*y^*+h^* = 0 \tag{F.11.18}$$

feltétel, ismert H^*, G^*, h^* együtthatókkal†.

A 4.1.2 pontbeli (4.7) becslő formula

$$\hat{y}^* = \hat{B}^*u^*+\hat{b}^* \tag{F.11.19}$$

alaku és megköveteljük, hogy a benne szereplő $\hat{B}^*$ és $\hat{b}^*$ együtthatókkal teljesüljön az (F.11.18) összefüggéssel analóg

$$H^*u^*+G^*\hat{y}^*+h^* = 0 \tag{F.11.2o}$$

feltétel.

A modell illeszkedési hiba mátrix a megfigyelt és az (F.11.19) becslő összefüggéssel számitott kimenet mátrixok különbsége:

$$E^* = \tilde{Y}^*-\hat{B}^*U^*-\hat{b}^*1' \tag{F.11.21}$$

ahol

$$U^* = (u_1^*,u_2^*,\ldots,u_j^*,\ldots,u_m^*)$$

és

$$\tilde{Y}^* = (\tilde{y}_1^*,\tilde{y}_2^*,\ldots,\tilde{y}_j^*,\ldots,\tilde{y}_m^*) \quad .$$

Az illeszkedési hiba mértéke ebből

---

†Kényelmi okokból itt az értekezés 4. fejezetében szereplő együtthatókat és változókat * jellel jelöljük. A jelzetlen mennyiségeket más értelemben fogjuk használni.

$$f = Tr(V^{-1/2}E^{*}W^{-1}E^{*\prime}V^{-1/2}) \quad . \qquad (F.11.22)$$

Az ismeretlen együtthatók korlátozott LKN becslése az a $\hat{B}^{*}$ és $\hat{b}^{*}$, amely kielégiti az (F.11.2o) feltételt, és az azt kielégitők közül a minimális f értéket adja. Mivel f pozitiv definit, ilyen együtthatórendszer létezik, ha egyáltalán van olyan együtthatórendszer, amivel a feltétel teljesül.

A feladat megoldását két egymást követő transzformációval visszavezetjük az a/pont szerinti homogén feltételes LKN becslésre. Először az eredeti változókat és együtthatókat transzformáljuk ugy, hogy az egyes változók megfigyelt értékeinek sulyozott átlaga 0-val legyen egyenlő. A második transzformáció során az inhomogén függvénykapcsolatot formálisan homogénné tesszük azáltal, hogy a független változók vektorát egy skaláris állandó elemmel, célszerüen 1-gyel,kibővitjük. Az ezen transzformáció után adódó összefüggésre alkalmazzuk az a/ pont szerinti feltételes LKN közelitést, majd kihasználva a transzformáció adta lehetőségeket, a becslő formulát egyszerüsitjük és átalakitjuk olyan alakra, amelyben az eredeti, transzformálatlan változók és az azok közötti kapcsolat együtthatói szerepelnek.

Jelöljük a j-edik megfigyelés eredeti transzformálatlan független ill. függő változó vektorát u_j^{*}-gal ill $\tilde{y}_j^{*}$-gal, az összes megfigyelés sulyozott átlagait $\bar{u}$-sal ill. $\bar{y}$-sal, a 0 sulyozott átlagra transzformált változókat u_j-vel ill. $\tilde{y}_j$-mal.

Az $\bar{u}$ ill. $\bar{y}$ sulyozott átlagokat az

$$\bar{u} = U^{*}W^{-1}1(1'W^{-1}1)^{-1} \qquad (F.11.23)$$

ill.

$$\bar{y} = \tilde{Y}^{*}W^{-1}1(1'W^{-1}1)^{-1} \qquad (F.11.24)$$

összefüggésekkel definiáljuk./Természetesen, ha W = I, akkor minthogy

$$1'W^{-1}1 = m,$$

a fenti összefüggésekből

$$\bar{u} = U^*1\cdot\frac{1}{m} = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} u_j^*$$

ill.

$$\bar{y} = Y^*1\cdot\frac{1}{m} = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} \tilde{y}_j^*\ ,$$

tehát a számtani közép adódik./

A sulyozott átlagra transzformált u és y változókat, ill. az ugyanigy transzformált megfigyeléseket az

$$u = u^*-\bar{u} \quad \text{ill.} \quad y = y^*-\bar{y}$$

ill. minden $j=1,2,\ldots m$-re az

$$u_j = u_j^*-\bar{u} \quad \text{ill.} \quad y_j = y_j^*-\bar{y}$$

összefüggésekkel definiáljuk.
Az u_j ill. $\tilde{y}_j$ megfigyelésekből U^* ill. $\tilde{Y}^*$ képzésével analóg módon képezzük az U ill. $\tilde{Y}$ mátrixokat. Legyen továbbá az U-val ill. $\tilde{Y}$-mal azonos számu oszlopból álló $\bar{U}$ ill. $\bar{Y}$

$$\bar{U} = (\bar{u},\bar{u},\ldots,\bar{u},\ldots\bar{u}) = \bar{u}\cdot 1'$$

ill.

$$\bar{Y} = (\bar{y},\bar{y},\ldots,\bar{y},\ldots\bar{y}) = \bar{y}\cdot 1'\ .$$

Igy fennáll az

$$U = U^*-\bar{U} \tag{F.11.25}$$

ill.

$$\tilde{Y} = \tilde{Y}^*-\bar{Y} \tag{F.11.26}$$

összefüggés a transzformált és tramszformálatlan mátrixok között.

Könnyen ellenőrizhető, hogy U ill. $\tilde{Y}$ oszlopainak sulyozott összege zérus vektor:

$$U \cdot W^{-1} \cdot 1 = U^{*}W^{-1}1 - U^{*}W^{-1}1(1'W^{-1}1)^{-1}1'W^{-1}1 = 0 \qquad (F.11.27)$$

és

$$\tilde{Y}W^{-1} \cdot 1 = \tilde{Y}^{*}W^{-1}1 - \tilde{Y}^{*}W^{-1}1(1'W^{-1}1)^{-1}1'W^{-1}1 = 0 \quad . \qquad (F.11.28)$$

A következőkben előállitjuk a feladat megfogalmazásában szereplő (F.11.17–22) összefüggések megfelelőit a transzformált változókkal és megvizsgáljuk az eredeti és a transzformált összefüggések együtthatóinak kapcsolatát.

A transzformált változókkal felirt matematikai modell legyen

$$y = Bu+b \quad .$$

Ebből a transzformációs összefüggések felhasználásával

$$y^{*}-\bar{y} = B(u^{*}-\bar{u})+b$$

tehát

$$y^{*} = Bu^{*}+(b+\bar{y}-B\bar{u})$$

adódik.

Hasonlóképpen az (F.11.18) feltétel megfelelője legyen

$$Hu+Gy+h = 0$$

Ebből a transzformációs összefüggések felhasználásával

$$H(u^{*}-\bar{u})+G(y^{*}-\bar{y})+h = 0 \quad ,$$

és átrendezve

$$Hu^{*}+Gy^{*}+(h-H\bar{u}-G\bar{y}) = 0$$

adódik.

A megfelelő együtthatók összevetéséből az eredeti és a transzformált összefüggések együtthatói közötti kapcsolat a következő:

$$B^{*} = B \quad , \qquad b^{*} = b+\bar{y}-B\bar{u} \quad , \qquad (F.11.29)$$

és

$$H^* = H \quad , \quad G^* = G \quad , \quad h^* = h-H\bar{u}-G\bar{y} \quad . \quad (F.11.3o)$$

A becslő formulát és az arra vonatkozó feltételt értelemszerüen az

$$\hat{y} = \hat{B}u+\hat{b} \quad ,$$

ill.

$$Hu+G\hat{y}+h = 0$$

alakban értjük, a becsült együtthatókra vonatkozó

$$\hat{B}^* = \hat{B} \quad \text{és} \quad \hat{b}^* = \hat{b}+\bar{y}-\hat{B}\bar{u}$$

transzformációs összefüggésekkel.

Az igy definiált becslő formulával az illeszkedési hiba mátrix a transzformációra invariáns. Legyen ui.

$$E = \tilde{Y}-\hat{B}U-\hat{b}1' \quad ,$$

akkor, (F.11.21)-ből a transzformációs összefüggéseket felhasználva

$$E^* = \tilde{Y}^*-\hat{B}^*U^*-\hat{b}^*1' =$$
$$= \tilde{Y}-\hat{B}^*U-(\hat{b}^*1'-\bar{Y}+\hat{B}^*\bar{U}) =$$
$$= \tilde{Y}-\hat{B}U-\hat{b}1' = E \quad .$$

Ebből kifolyólag az f illeszkedési hiba mérték is invariáns a transzformációra.

A feladatot ezek után visszavezetjük az a/ pontban már megoldott homogén feltételes LKN együtthatóbecslés feladatára, ugy hogy a független változó vektort kibővitjük egy skaláris állandó elemmel, célszerüen 1-gyel. Igy a változók és állandók értelemszerüen az alábbiak szerint felelnek meg egymásnak:

$$\left.\begin{array}{cc}
\text{homogén} & \text{inhomogén} \\
x & \begin{pmatrix} u \\ --- \\ 1 \end{pmatrix} \\
X & \begin{pmatrix} U \\ --- \\ 1 \end{pmatrix} \\
y & y \\
Y & Y \\
C & (B \mid b) \\
K & (H \mid h) \\
J & G \\
V & V \\
W & W
\end{array}\right\} \qquad (F.11.31)$$

Belátható, hogy a független változók O sulyozott átlagra való transzformálása következtében a homogén feladat megoldását jelentő (F.11.11) összefüggésben szereplő $XW^{-1}X'$ mátrix az

$$X = \begin{pmatrix} U \\ --- \\ 1' \end{pmatrix}$$

helyettesités után blokkdiagonálissá válik. Az (F.11.27) összefüggést felhasználva ui.

$$(XW^{-1}X')^{-1} = \left(\begin{pmatrix} U \\ --- \\ 1' \end{pmatrix} W^{-1} (U' \mid 1)\right)^{-1} =$$

$$= \begin{pmatrix} UW^{-1}U' & \vert & O \\ \hline O' & \vert & 1'W^{-1}1 \end{pmatrix}^{-1} =$$

$$= \begin{pmatrix} (UW^{-1}U')^{-1} & \vert & O \\ \hline O' & \vert & (1W^{-1}1)^{-1} \end{pmatrix} . \qquad (F.11.32)$$

Ezt használjuk fel, miután az F.11.11 összefüggésben elvégeztük a megfelelő helyettesitéseket:

$$(\hat{B} \mid \hat{b}) = \tilde{Y}W^{-1}(U' \mid 1)\left(\begin{array}{c|c} (UW^{-1}U')^{-1} & O \\ \hline O & (1'W^{-1}1)^{-1} \end{array}\right) -$$

$$- VG'(GVG')^{-1}(G\tilde{Y}+(H \mid h)\left(\frac{U}{1'}\right))W^{-1}(U' \mid 1)\left(\begin{array}{c|c} (UW^{-1}U')^{-1} & O \\ \hline O' & (1'W^{-1}1)^{-1} \end{array}\right) . \tag{F.11.33}$$

Ez, a hipermátrix irásmódot felbontva két összefüggéssé bomlik:

$$\hat{B} = \tilde{Y}W^{-1}U'(UW^{-1}U')^{-1} - VG'(GVG')^{-1}(G\tilde{Y}+HU+h1')W^{-1}U'(UW^{-1}U')^{-1} \tag{F.11.34}$$

$$\hat{b} = \tilde{Y}W^{-1}1(1W^{-1}1')^{-1} - VG'(GVG')^{-1}(G\tilde{Y}+HU+h1')W^{-1}1(1'W^{-1}1)^{-1} . \tag{F.11.35}$$

Ezekből, ujra kihasználva az (F.11.27–28) összefüggést

$$\hat{B} = \tilde{Y}W^{-1}U'(UW^{-1}U')^{-1} - VG'(GVG')^{-1}(G\tilde{Y}+HU)W^{-1}U'(UW^{-1}U')^{-1} \tag{F.11.36}$$

és

$$\hat{b} = -VG'(GVG')^{-1}h \tag{F.11.37}$$

adódik. Figyeljük meg, hogy annak következtében, hogy a változók sulyozott összege zérus, $\hat{B}$ $\hat{b}$-tól függetlenül számitható. Mivel az (F.11.36) összefüggés (F.11.11)-gyel azonos alaku, az utóbbi megoldásával kapcsolatos megállapitásaink erre is érvényesek, igy tehát $\hat{B}$ számitása is egyszerüsithető, ha először a B_f szabad LKN közelitését számitjuk ki a

$$B_f = \tilde{Y}W^{-1}U'(UW^{-1}U')^{-1} \tag{F.11.38}$$

összefüggéssel. Ezzel $\hat{B}$-t a

$$\hat{B} = B_f - VG(GVG')^{-1}(GB_f+H) \tag{F.11.39}$$

összefüggéssel számitjuk.

Végül az (F.11.25–26) és (F.11.29–30) transzformációs összefüggések felhasználásával nyerjük az (F.11.19) becslő formula állandóinak feltételes LKN becslését:

$$\boxed{\hat{B}^* = B_f^* - VG^{*\prime}(G^*VG^{*\prime})^{-1}(G^*B_f^*+H^*)} \qquad (F.11.4o)$$

ahol

$$\boxed{B_f^* = (\tilde{Y}^*-\bar{Y})W^{-1}(U^*-\bar{U})'((U^*-\bar{U})W^{-1}(U^*-\bar{U})')^{-1}} \qquad (F.11.41)$$

a B^* együttható szabad LKN becslése, és

$$\boxed{\hat{b}^* = \bar{y}-\hat{B}^*\bar{u}-VG^{*\prime}(G^*VG^{*\prime})^{-1}(h^*+G^*\bar{y}+H^*\bar{u})} \quad . \qquad (F.11.42)$$

Az igy kapott együtthatók szerepelnek (a * jelzések elhagyásával) a 4.fejezet (4.15–4.17) összefüggéseiben a mérlegegyenleteket kielégitő statikus matematikai modellek együtthatóinak LKN becsléseként.

c/

A becsült együtthatók és kimenetek torzitatlansága

A torzitatlanság vizsgálata előtt röviden összefoglaljuk a becslés tulajdonságainak vizsgálata során a c/ és d/ pontban közösen alkalmazott megfontolásainkat és feltevéseinket.

Csak az a/ pontban tárgyalt homogén lineáris esetet vizsgáljuk. Mint a b/ pontban láttuk, az inhomogén eset a homogén probléma olyan speciális esetének tekinthető, ahol az egyik független változó állandó. Igy a homogén esetre tett megállapitásaink az inhomogén esetben is érvényesek.

Feltételezzük, hogy az illeszkedési hiba a modell független változóitól statisztikusan független és O várható értékü.
A modell adekvát, vagyis a valódi változók valamilyen C-vel kielégitik az (F.11.1) összefüggést, C pedig kielégiti az (F.11.2) feltételt.

A modell együtthatók becslésének torzitatlansága azt jelenti, hogy

$$E(\hat{C}) = C \quad .$$

Könnyen belátható, hogy feltételeink teljesülése esetén ez igaz. Képezzük ehhez először (F.11.12)-ből a szabad becsléssel nyert együttható várható értékét, felhasználva (F.11.14)-et:

$$E(C_f) = E(\tilde{Y}W^{-1}X')(XW^{-1}X')^{-1} =$$

$$= E(CXW^{-1}X')(XW^{-1}X')^{-1}+E(EW^{-1}X')(XW^{-1}X')^{-1}$$

Kihasználva, hogy E statisztikusan független X-től és 0 várható értékü, következik, hogy

$$E(C_f) = C+E(E)W^{-1}X(XW^{-1}X')^{-1} = C \quad .$$

Ezt felhasználva a feltételes becsléssel nyert együttható várható értéke, az (F.11.2) feltételt is felhasználva:

$$E(\hat{C}) = E(C_f)-E(VJ'(JVJ')^{-1}(JC_f+K)) =$$

$$= C-VJ'(JVJ')^{-1}(JE(C_f)+K)) = C$$

A feltételes becsléssel nyert együttható tehát torzitatlan.

A becsült kimenet torzitatlansága közvetlenül belátható az együttható torzitatlanságából, és az illeszkedési hibára tett feltevéseinkből. Az

$$y_f = C_f x$$

ill.

$$\hat{y} = \hat{C}x$$

becslő formula szerint

$$E(y_f) = E(C_f x) = E(C_f)\cdot x = y \quad ,$$

ill. analóg módon

$$E(\hat{y}) = y \quad .$$

Mindkét féle LKN becslés tehát torzitatlan.

d/

A kimenet becslési hibájának sulyozott varianciája

Nem lenne gyakorlati jelentősége annak, hogy képletszerüen megadjuk a becslési hibák szórását. A rövidség kedvéért arra szoritkozunk, hogy megmutassuk, hogy a c/ pontbeli kiindulási feltételek teljesülése esetén a kimenet feltételes LKN becsléssel adódó becslési hibájának sulyozott varianciája kisebb vagy egyenlő a szabad LKN becsléssel nyert becslés hibájának sulyozott varianciájánál.

A kimenet becslési hibájának sulyozott varianciája, felhasználva az együtthatóbecslés torzitatlanságát és az illeszkedési hiba **x** független változótól való statisztikus függetlenségét:

$$\begin{aligned} V(\hat{y}) &= E((\hat{y}-y)'V^{-1}(\hat{y}-y)) = \\ &= E((\hat{C}x-Cx)'V^{-1}(\hat{C}x-Cx)) = \\ &= E(x'(\hat{C}-C)'V^{-1}(\hat{C}-C)x) = \\ &= x'E((\hat{C}-C)'V^{-1}(\hat{C}-C))x \quad . \end{aligned}$$

A következőkben megmutatjuk, hogy a kiindulási feltételek teljesülése esetén **y** feltételes LKN becsléssel adódó becslési hibájának varianciája kisebb vagy egyenlő a szabad LKN becsléssel nyert becslés hibájának varianciájánál.

A szabad LKN becslés hibájának varianciája ezzel teljesen analóg módon

$$V(y_f) = x'E((C_f-C)'V^{-1}(C_f-C))x \quad .$$

Az (F.11.2), (F.11.4) és (F.11.13) összefüggéseket, valamint $\hat{\mathbf{C}}$ és **X** statisztikus függetlenségét felhasználva elemi számítással adódik, hogy

$$E((\hat{C}-C)V^{-1}(\hat{C}-C)) = E((C_f-C)V^{-1}(C_f-C)-$$

$$-(XW^{-1}X')^{-1}XW^{-1}E(E'J'(JVJ')^{-1}JE)W^{-1}X'(XW^{-1}X')^{-1}$$

A baloldal valamint a jobboldal első tagja pozitiv definit, a jobboldal második tagja pozitiv szemidefinit. Ebből következik, hogy tetszőleges **x** vektorral

$$x'E((\hat{C}-C)'V^{-1}(\hat{C}-C))x \leqq x'E((C_f-C)'V^{-1}(C_f-C))x \quad ,$$

tehát tetszőleges rögzitett bemenetre

$$V(\hat{y}) \leqq V(y_f) \quad ,$$

vagyis, hogy a feltételt figyelembe vevő becslés hibájának szórása kisebb vagy egyenlő a szabad becslés hibájának szórásánál. A két szórás egyenlősége csak abban az esetben áll fenn, ha az **x** bemenet a független változók terének egy meghatározott alterébe esik.

F.12 Dinamikus modell illesztése a mérlegegyenletekhez

Az értekezés 5.3.2 pontjában az (5.22–23) összefüggésekkel megfogalmazott feladat az

$$f = Tr(V^{-1/2}(Y-\Omega\Phi)W^{-1}(Y'-\Phi'\Omega')V^{-1/2}) \tag{F.12.1}$$

célfüggvény minimalizálása a

$$\mathbf{P}(\mathbf{H}+\Omega\Sigma)-\mathbf{G} = 0 \quad . \tag{F.12.2}$$

feltétel mellett Ω és $\mathbf{P}$ szerint, ahol valamennyi ismert mátrix maximális rangu és $\mathbf{G}$ sorainak száma kisebb oszlopainak számánál. A feltétel nem lineáris, mivel benne az ismeretlen $\mathbf{P}$ és Ω mátrixok szorzata szerepel.

Az alábbiakban egy olyan algoritmust ismertetünk, amelyben az ismeretlenek egy részét nemlineáris módszerrel határozzuk meg, majd ezek ismeretében a fennmaradókat lényegében az F.11 függelékben alkalmazott korlátozott LKN módszerhez hasonlóan számitjuk.

Transzformáljuk ehhez az (F.12.2) feltételt

$$\Pi(\mathbf{H}+\Omega\Sigma)-\mathbf{TG} = 0 \tag{F.12.3}$$

alakra, ahol $\mathbf{T}$ $n(g)\cdot n(g)$ méretü nemszinguláris mátrix és

$$\Pi = \mathbf{TP} \quad .$$

Az (F.12.3) összefüggés Π rögzitésével lineáris az ismeretlen Ω-ban és $\mathbf{T}$-ben.

Az optimális Ω^o együtthatórendszer meghatározásához először rögzitett Π-hez megkeressük az optimális Ω és $\mathbf{T}$ mátrixokat. Az igy Π-től függő Ω-t a célfüggvénybe helyettesitve kapjuk az Ω és $\mathbf{T}$ szerint már optimális, de Π-től még függő célfüggvényt. Ezt a Π-ben nem kvadratikus optimalizálási feladatot megoldva nyerjük a keresett optimumhelynek megfelelő Π^o-t, végül ebből Ω^{o}-t és T^{o}-t.

A rögzitett Π melletti optimumkereséshez alkalmazzuk az F.15 függelék szerint a Lagrange-multiplikátorok módszerét. A kibővitett célfüggvény

$$f' = \frac{1}{2}Tr(V^{-1/2}(Y-\Omega\Phi)W^{-1}(Y'-\Phi'\Omega')V^{-1/2} +$$

$$+ Tr(K'(\Pi(H+\Omega\Sigma)-TG)) \quad . \qquad (F.12.4)$$

A parciális deriváltakat 0-val tesszük egyenlővé /lásd az F.14 függeléket/:

$$\frac{\partial f'}{\partial\Omega} = -V^{-1}YW^{-1}\Phi'+V^{-1}\Omega_{\Pi}\Phi W^{-1}\Phi'+\Pi'K\Sigma' = 0 \qquad (F.12.5)$$

$$\frac{\partial f'}{\partial T} = -KG' = 0 \qquad (F.12.6)$$

$$\frac{\partial f'}{\partial K} = \Pi(H+\Omega_{\Pi}\Sigma)-TG = 0 \quad . \qquad (F.12.7)$$

Az igy adódó lineáris egyenletrendszert kielégitő Ω_{Π} T és K mátrixok "mátrix Gauss elimináció"-val határozhatók meg az F.12.1 táblázat szerint*.

Ebből

$$\Omega_{\Pi} = \Omega^{*}-V^{1/2}F_{\Pi}V^{-1/2}S^{*}Z \quad , \qquad (F.12.8)$$

ahol Ω^{*} a szabad LKN becslés:

$$\Omega^{*} = YW^{-1}\Phi'(\Phi W^{-1}\Phi')^{-1} \quad .$$

S^{*} az ebből adódó, a mérlegegyenleteket általában ki nem elégitő statikus modell együtthatórendszere:

$$S^{*} = H+\Omega^{*}\Sigma$$

---

* A táblázatban $n(v)$-vel az összes változóK /bemenetek és kimenetek/ számának összegét jelöltük. A Π indexeket helytakarékosság céljából elhagytuk.

Képzés	Ω	K	T	I	Jelölés	Szükséges feltétel
1 := (F.12.5)	$V^{-1}\Omega\Phi W^{-1}\Phi'$	$\Pi'K\Sigma'$		$-V^{-1}YW^{-1}\Phi'$	$L=(\Phi W^{-1}\Phi')^{-1}$	$m \geq n(\Phi)$
2 := (F.12.6)		$-KG'$				
3 := (F.12.7)	$\Pi\Omega\Sigma$		$-TG$	ΠH		
4 = V 1 L	Ω	$V\Pi'K\Sigma'L$		$-YW^{-1}\Phi'L$	$\Omega^{\times}=YW^{-1}\Phi'L$	
5 = 2		$-KG'$			$M=(\Pi V\Pi')^{-1}$	$n(y) \geq n(g)$
6 = 3 − Π 4 Σ		$-\Pi V\Pi'K\Sigma'L\Sigma$	$-TG$	$\Pi(H+\Omega^{\times}\Sigma)$	$N=(\Sigma'L\Sigma)^{-1}$	$n(\Phi) \geq n(v)$
7 = −M 6 N		K	$MTGN$	$-M\Pi S^{\times}N$	$S^{\times}=H+\Omega^{\times}\Sigma$	
8 = 5 − 7 G'			$-MTGNG'$	$M\Pi S^{\times}NG'$	$Q=(GNG')^{-1}$	$n(v) \geq n(g)$
9 = −M⁻¹ 8 Q			T	$-\Pi S^{\times}NG'Q$		
10 = 7 − M 9 GN		K		$-M\Pi S^{\times}(N-NG'QGN)$		
11 = 4 − VΠ' 10 Σ'L	Ω			$-\Omega^{\times}+V\Pi'M\Pi S^{\times}(N-NG'QGN)\Sigma'L$	$F=V^{1/2}\Pi'M\Pi V^{1/2}$	
12 => (F.12.8)	Ω			$-\Omega^{\times}+V^{1/2}FV^{-1/2}S^{\times}Z$	$Z=(N-NG'QGN)\Sigma'L$	

F.12.1 táblázat

Az (F.12.5-7) mátrixegyenlet rendszer megoldása "mátrix Gauss elimináció"-val továbbá

$$F_{\Pi} = V^{1/2}\Pi'(\Pi V\Pi')^{-1}\Pi V^{1/2}$$

és

$$Z = (N-NG'(GNG')^{-1}GN)\cdot\Sigma'(\Phi W^{-1}\Phi')^{-1} \quad .$$

Ez utóbbiban

$$N = (\Sigma'(\Phi W^{-1}\Phi')^{-1}\Sigma)^{-1} \quad .$$

A rögzitett **F** melletti, Ω és **T** szerint optimális célfüggvény érték tehát (F.12.1) szerint

$$f_{\Pi} = Tr(V^{-1/2}(Y-(\Omega^*-V^{1/2}F_{\Pi}V^{-1/2}S^*Z)\Phi)W^{-1}(Y-(\Omega^*-V^{1/2}F_{\Pi}V^{-1/2}S^*Z)\Phi)'V^{-1/2}) =$$

$$= Tr((V^{-1/2}(Y-\Omega^*\Phi)+F_{\Pi}V^{-1/2}S^*Z\Phi)W^{-1}(V^{-1/2}(Y-\Omega^*\Phi)+F_{\Pi}V^{-1/2}S^*Z\Phi)') \quad .$$

Bevezetve továbbá az Ω^* becslésből adódó egyenlethiba mátrixra a

$$\Delta^* = Y-\Omega^*\Phi$$

és az összevont

$$D = S^*Z\Phi$$

jelölést, a célfüggvényt

$$f_{\Pi} = Tr((V^{-1/2}\Delta^*+F_{\Pi}V^{-1/2}D)W^{-1}(\Delta^{*\prime}V^{-1/2}+D'V^{-1/2}F_{\Pi}')) \quad . \qquad \text{(F.12.9)}$$

alakban nyerjük.

Az (F.12.9) célfüggvény értéke F_{Π}-n keresztül Π megválasztásától függ. Meg kell tehát határoznunk a minimumot biztositó Π^o mátrixot. Ehhez az f célfüggvényt alkalmasabb, egyszerübb alakra transzformáljuk, felhasználva azt, hogy F_{Π} projektormátrix és szimmetrikus, tehát hogy

$$F_{\Pi}\cdot F_{\Pi} = F_{\Pi}$$

és

$$F_{\Pi}' = F_{\Pi} \quad ,$$

továbbá, hogy

$$Tr(A\cdot B) = Tr(B\cdot A) \quad .$$

$$f_\Pi = Tr(V^{-1/2}\Delta^*W^{-1}\Delta^{*\prime}V^{-1/2}+V^{-1/2}\Delta^*W^{-1}D'V^{-1/2}F_\Pi+$$

$$+F_\Pi V^{-1/2}DW^{-1}\Delta^{*\prime}V^{-1/2}+F_\Pi V^{-1/2}DW^{-1}D'V^{-1/2}F_\Pi) =$$

$$= Tr(V^{-1/2}\Delta^*W^{-1}\Delta^{*\prime}V^{-1/2})+$$

$$+Tr(F_\Pi V^{-1/2}(\Delta^*W^{-1}D'+DW^{-1}\Delta^{*\prime}+DW^{-1}D')V^{-1/2}F_\Pi) \quad . \qquad (F.12.1o)$$

Az első tag Π-től független, tehát elhegyásával a minimumhely nem változik. A második tagban összevont jelölést alkalmazunk. Igy a célfüggvény

$$h = Tr(F_\Pi \Gamma F_\Pi) \to \min_\Pi \qquad (F.12.11)$$

alaku, ahol

$$\Gamma = V^{-1/2}(\Delta^*W^{-1}D'+DW^{-1}\Delta^{*\prime}+DW^{-1}D')V^{-1/2}$$

$n(y)\cdot n(y)$ méretü szimmetrikus mátrix. Nyilván h F_Π-n keresztül függ Π-től. Figyeljük meg, hogy F_Π szinguláris és rangja Π rangjával egyenlő. A h célfüggvény Π szerinti minimumhelye F_Π szerinti feltételes minimalizálással is meghatározható, figyelembe véve, hogy F_Π $r(\Pi)$ rangu projektormátrix. A transzformált feladat tehát

$$h = Tr(F_\Pi \Gamma F_\Pi) \to \min_{F_\Pi} \qquad (F.12.12)$$

feltéve, hogy

$$F_\Pi \cdot F_\Pi = F_\Pi \quad ,$$

$$F_\Pi' = F_\Pi$$

$$r(F_\Pi) = r(\Pi) \quad .$$

Belátható, hogy bármelyik ilyen tulajdonságu F_Π mátrix előállitható egy az F_Π soraival egyenlő, tehát $n(y)$ számu sorból és $r(\Pi)$, tehát $n(g)$ számu egymásra ortogonális egységvektorból álló mátrix saját transzponáltjával való szorzataként. Jelöljük ezt a mátrixot E-vel:

$$F_{\Pi} = EE' \tag{F.12.13}$$

ahol

$$E'E = I \quad . \tag{F.12.14}$$

Igy a célfüggvény:

$$h = Tr(EE'\Gamma EE') = Tr(E'\Gamma EE'E)$$

tehát

$$h = Tr(E'\Gamma E) \quad . \tag{F.12.15}$$

Képezzük Γ kanonikus felbontását. Minthogy Γ szimmetrikus, valamennyi sajátértéke és sajátvektora valós. Jelöljük a sajátértékek $n(y) \cdot n(y)$ méretü diagonális mátrixát Λ-val, a sajátvektorok azonos méretü ortonormált mátrixát **X**-szel. Igy létezik a

$$\Gamma = X\Lambda X' \tag{F.12.16}$$

felbontás, ahol

$$XX' = X'X = I \quad . \tag{F.12.17}$$

Az általánosság megszoritása nélkül feltételezhetjük, hogy a Λ diagonálmátrix $\lambda_{i,i}$ diagonális elemeire fennállnak a

$$\lambda_{1,1} \leq \lambda_{2,2} \leq \ldots \leq \lambda_{n(g)-1,n(g)-1} \leq \lambda_{n(g),n(g)} \leq$$
$$\leq \ldots \leq \lambda_{n(y)n(y)}$$

relációk.

Vezessük be a

$$R = E'X \tag{F.12.18}$$

jelölést, ezzel

$$h = Tr(R\Lambda R') \quad , \tag{F.12.19}$$

és nyilvánvalóan

$$RR' = I \quad .$$

Jelöljük az R mátrix i-edik sorának k-adik elemét r_{ik}-val. Itt nem részletezett módon, skalár irásmódra áttérve a célfüggvény

$$h = \sum_{k=1}^{n(y)} (\lambda_{kk} \cdot \sum_{i=1}^{n(g)} r_{ik}^2) \tag{F.12.2o}$$

alakban adódik, a

$$\sum_{k=1}^{n(y)} r_{ik}^2 = 1 \qquad i=1,2,\dots,n(g)$$

$$\sum_{k=1}^{n(y)} r_{ik} r_{jk} = 0 \qquad \begin{array}{l} i=1,2,\dots,n(g) \\ j=1,2,\dots,n(g) \\ i \neq j\text{-re} \end{array}$$

feltételekkel. A h célfüggvény F.13 függelék szerinti feltételes minimum értéke elérhető, ha R i-edik sorának rendre az i-edik $n(y)$ dimenziós egységvektort választjuk.

Igy

$$R^{o} = (I \;\vdots\; 0) \tag{F.12.21}$$

és a minimum érték

$$h^{o} = \sum_{k=1}^{n(g)} \lambda_{kk} = Tr(R^{o} \Lambda R^{o\prime}) \quad , \tag{F.12.22}$$

vagyis Γ sajátértékei közül az $n(g)$ számu legkisebb összege.

Megjegyezzük, hogy a minimumhely nem egyértelmü. A kiválasztott egységvektorok által kifeszitett altér tetszőleges ortonormális bázisrendszere egyenértékü a R^{o} minimumhellyel.

(F.12.17)-ből és (F.12.18)-ból következően a minimumhelynek megfelelő E^{o} mátrix

$$E^{o} = XR^{o\prime} = X \begin{pmatrix} I \\ \hline 0 \end{pmatrix} = (x_1, x_2, \dots, x_{n(g)}) \quad , \tag{F.12.23}$$

vagyis E^{o} a Γ mátrix $n(g)$ számu legkisebb sajátértékéhez tartozó sajátvektorokból, mint oszlopokból képzett $n(y)\cdot n(g)$ méretü mátrix.

Végül belátható, hogy (F.12.13)-nak megfelelően

$$F^{o} = E^{o}E^{o\prime} \quad . \qquad (F.12.24)$$

Az optimális Ω^{o} együtthatórendszer $\mathbf{F}^{o}$-nak (F.12.8)-ba helyettesitésével adódik:

$$\boxed{\Omega^{o} = \Omega^{*} - V^{1/2}F^{o}V^{-1/2}S^{*}Z} \quad . \qquad (F.12.25)$$

Π^{o}, T^{o} és P^{o} értékeire Ω^{o} kiszámitásához nincs szükség. Ha mégis - pl. ellenőrzés céljaira - szükséges, Π^{o} $\mathbf{E}^{o}$-ból számitható. Lehetséges értékei

$$\Pi^{o} = \Theta\cdot E^{o\prime}V^{-1/2} \qquad (F.12.26)$$

alakuak, ahol Θ tetszőleges nemszinguláris $n(g)\cdot n(g)$ méretü mátrix. /A formula helyessége az $\mathbf{F}$-et definiáló összefüggésbe való helyettesitéssel ellenőrizhető./ T^{o} az (F.12.1) táblázat alapján meghatározható a

$$T^{o} = \Pi^{o}S^{*}NG'(GNG')^{-1} \qquad (F.12.27)$$

összefüggésből.

Végül az (F.12.2) összefüggésben szereplő $\mathbf{P}$ mátrix optimális értéke

$$P^{o} = (T^{o})^{-1}\Pi^{o} \quad . \qquad (F.12.28)$$

Végezetül megjegyezzük, hogy ha a dinamikus modellt nem a mérlegegyenlethez, hanem a rendszer egy már ismert lineáris statikus modelljéhez akarjuk illeszteni, tehát ha $n(g) = n(y)$, akkor az (F.12.2) feltételrendszerben az ismeretlen $\mathbf{P}$ mátrix kvadratikus és nemszinguláris, tehát invertálható. Igy az (F.12.3) feltételrendszerben T^{o}-t P^{-1}-nek lehet választani. Ebből következően a további összefüggések a

$$\Pi^o = I$$

helyettesitéssel érvényesek, amiből nyilvánvalóan

$$F^o = I$$

és

$$\Omega^o = \Omega^* - S^* Z$$

következik. Ez utóbbi esetben tehát a feladat sajátértékek számitása nélkül is megoldható.

F.13 Egy korlátozott szélsőértékfeladat megoldása

(Sztanó Tamás)

Feladatunk az F.12 függelék (F.12.2o) összefüggése szerinti

$$h = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k \sum_{i=1}^{m} r_{ik}^2 \tag{F.13.1}$$

célfüggvény minimalizálása, ahol $m < n$ és

$$\sum_{k=1}^{n} r_{ik}^2 = 1, \sum_{k=1}^{n} r_{ik} r_{jk} = 0 \quad (\text{ha } i \neq j) . \tag{F.13.2}$$

Legyen

$$0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_m \leq \ldots \leq \lambda_n \tag{F.13.3}$$

és tekintsük a

$$g = \sum_{k=1}^{m} \lambda_k - h$$

kifejezést. Az alábbiakban belátjuk, hogy $g \leq 0$:

$$g = \sum_{k=1}^{m} \lambda_k - \sum_{k=1}^{n} \lambda_k \sum_{i=1}^{m} r_{ik}^2 = \sum_{k=1}^{m} \lambda_k (1 - \sum_{i=1}^{m} r_{ik}^2) - \sum_{k=m+1}^{n} \lambda_k \sum_{i=1}^{m} r_{ik}^2 \leq$$

$$\leq \sum_{k=1}^{m} \lambda_k (1 - \sum_{i=1}^{m} r_{ik}^2) - \sum_{k=m+1}^{n} \lambda_{m+1} \sum_{i=1}^{m} r_{ik}^2 =$$

$$= \sum_{k=1}^{m} \lambda_k (1 - \sum_{i=1}^{m} r_{ik}^2) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_{m+1} (1 - \sum_{k=1}^{m} r_{ik}^2) =$$

$$= \sum_{k=1}^{m} (\lambda_k - \lambda_{m+1})(1 - \sum_{i=1}^{m} r_{ik}^2) +$$

$$+ \lambda_{m+1} \left[\sum_{k=1}^{m} (1 - \sum_{i=1}^{m} r_{ik}^2) - \sum_{i=1}^{m} (1 - \sum_{k=1}^{m} r_{ik}^2) \right] =$$

$$= \sum_{k=1}^{m} (\lambda_k - \lambda_{m+1})(1 - \sum_{i=1}^{m} r_{ik}^2) +$$

$$+ \lambda_{m+1} \left[\sum_{k=1}^{m} 1 - \sum_{i=1}^{m} 1 - \sum_{k=1}^{m} \sum_{i=1}^{m} r_{ik}^2 + \sum_{i=1}^{m} \sum_{k=1}^{m} r_{ik}^2 \right] =$$

$$= \sum_{k=1}^{m} (\lambda_k - \lambda_{m+1})(1 - \sum_{i=1}^{m} r_{ik}^2) \leq 0 \quad .$$

Az összeg valamennyi tagjában ui. az első tényező (F.13.3)-ból következően nem pozitiv, a második tényező (F.13.2)-ből következően pedig nem negativ.

A $g \leq 0$ állitást tehát bizonyitottuk, amiből nyilván

$$h \geq \sum_{k=1}^{m} \lambda_k \quad . \qquad (F.13.4)$$

A h célfüggvény tehát nem lehet kisebb az m számu legkisebb sajátérték összegénél. Könnyen belátható, hogy az egyenlőség megvalósitható az

$$r_{ik} = \begin{cases} 1 & \text{ha } i=k \\ 0 & \text{ha } i \neq k \end{cases} \qquad (F.13.5)$$

választással. Az ilyen módon választott r_{ik}-k tehát biztositják a h célfüggvény minimumát, kielégitve egyuttal az (F.13.2) feltételrendszert is.

F.14 Néhány elemi skalár-mátrix függvény deriváltja

(Sztanó Tamás)

Egy tetszőleges $f(X)$ skalár-mátrix függvény /jobboldali/ deriváltjának nevezzük azt a $\frac{d}{dX}f(X)$ mátrixot, amivel

$$\delta f = f(X+\Delta)-f(X) = Tr(\Delta'\frac{d}{dX}f(X))+\varepsilon_\Delta$$

és

$$\|\Delta\| \to 0 \quad \text{esetén} \quad \frac{|\varepsilon|}{\|\Delta\|} \to 0 \quad ,$$

ahol $\|X\|^2 = Tr(X'X)$ /Euklideszi norma/.

1. $f(X) = Tr(X'A)$

$$\frac{d}{dX} Tr(X'A) = A \quad . \qquad (F.14.1)$$

Mivel

$$Tr(X'A+\Delta'A)-Tr(X'A) = Tr(\Delta'A) \quad .$$

Ebből következik továbbá, hogy

$$\frac{d}{dX} Tr(AX) = A' \quad .$$

2. $f(X) = Tr(X'AX)$

$$\frac{d}{dX} Tr(X'AX) = (A+A')X \quad . \qquad (F.14.2)$$

Mivel

$$Tr((X+\Delta)'A(X+\Delta)-X'AX) = Tr(\Delta'AX+X'A\Delta+\Delta'A\Delta) =$$

$$= Tr(\Delta'AX+\Delta'A'X) + Tr(\Delta'A\Delta) =$$

$$= Tr(\Delta'(A+A')X)+Tr(\Delta'A\Delta) \quad ,$$

és a "maradéktagra" felhasználva a

$|Tr(U'V)| \leq \|U\| \cdot \|V\|$ ill. $\|UV\| \leq \|U\| \cdot \|V\|$

egyenlőtlenségeket

$|\varepsilon| \leq |Tr(\Delta' A\Delta)| \leq \|A\| \cdot \|\Delta\|^2$.

Tehát

$$\frac{|\varepsilon|}{\|\Delta\|} \leq \|A\| \cdot \|\Delta\| \to 0 \quad .$$

3. $f(X) = Tr(X^{-1})$

$$\frac{d}{dX} Tr(X^{-1}) = -(X')^{-2} \qquad \text{(F.14.3)}$$

Kiindulva az elemi uton igazolható

$$(X+\Delta)^{-1}-X^{-1} = -X^{-1}\Delta X^{-1}+(X+\Delta)^{-1}\Delta X^{-1}\Delta X^{-1}$$

azonosságból

$$Tr(X+\Delta)^{-1}-Tr(X^{-1}) = -Tr(X^{-1}\Delta X^{-1})+$$
$$+Tr((X+\Delta)^{-1}\Delta X^{-1}\Delta X^{-1}) = -Tr(\Delta'(X')^{-2})+\varepsilon \quad ,$$

ahol

$$|\varepsilon| \leq \|\Delta\| \cdot \|X^{-1}\|^2 \cdot \|(X+\Delta^{-1})\| \quad ,$$

és itt nem szinguláris X esetén $\|X^{-1}\|$ -val együtt $(X+\Delta)^{-1}$ is korlátos, hacsak $\|\Delta\|$ elég kicsi, s igy $\|\Delta\| \to 0$ esetén

$$\frac{|\varepsilon|}{\|\Delta\|} \to 0 \quad .$$

4. $f(X) = g(CXD)$

Ha $g(Z)$ differenciálható a $Z = CXD$ helyen, akkor

$$\frac{d}{dX}\, g(CXD) = C'\cdot\left(\left.\frac{dg(Z)}{dZ}\right|_{Z=CXD}\right)\cdot D' \quad . \qquad (F.14.4)$$

Valóban

$$g(C(X+\Delta)D) - g(CXD) = g(CXD+C\Delta D)-g(CXD) =$$

$$= Tr\left((C\Delta D)'\left.\frac{dg(Z)}{dZ}\right|_{Z=CXD}\right)+\varepsilon_{C\Delta D} =$$

$$= Tr\left(\Delta' C'\frac{dg(Z)}{dZ}\, D'\right)+\varepsilon_{C\Delta D} \quad ,$$

és

$$\frac{|\varepsilon|}{\|C\Delta D\|} \to 0\text{-ból}$$

$$\frac{\|C\|\,\|D\|\,|\varepsilon|}{\|C\Delta D\|} \to 0 \quad ,$$

majd ebből, tekintettel a normára érvényes

$$\|C\Delta D\| \leq \|C\|\|D\|\|\Delta\|$$

egyenlőtlenségre, következik

$$\frac{|\varepsilon|}{\|\Delta\|} \to 0 \quad .$$

Néhány más formula található még a [7] közlemény függelékében.

F.15 Lagrange multiplikátor mátrixok

Legyen $f(X)$ egy $n(i)\cdot n(j)$ méretü $X = \{x_{i,j}\}$ mátrixtól függő skalár függvény és legyen feladatunk $f(X)$ X szerinti szélsőértékhelyének meghatározása az $n(k)\cdot n(l)$számu

$$g_{k,l}(X) = 0 \qquad \begin{array}{l} k = 1,2,\dots. \\ l = 1,2,\dots. \end{array}$$

feltételből álló feltételrendszer, azaz a

$$G(X) = 0$$

mátrixegyenlet, mint feltétel teljesülése mellett.

A feltételes szélsőértékfeladatok Lagrange multiplikátoros megoldási módja szerint a célfüggvényt a 0-ra kifejezett feltételi egyenleteknek egy-egy ismeretlen $\lambda_{k,l}$-szeresének összegével bővitjük ki:

$$\varphi(X,\lambda_{k,l};\ k=1,2,\dots;\ l=1,2,\dots) = f(X)+\sum_{k=1}^{n(k)}\ \sum_{l=1}^{n(l)} \lambda_{k,l}g_{k,l}(X)$$

Nyilvánvaló, hogy egy $G(X)$-szel azonos méretü

$$\Lambda = \{\lambda_{k,l}\}$$

Lagrange multiplikátor mátrixszal a kibővitett célfüggvény

$$\varphi(X,\Lambda) = f(X)+Tr(\Lambda'\cdot G(X))$$

alaku.

φ kétféle felirása nyilvánvalóan egyenértékü. Az F.14.függelékben a skalár-mátrix függvények deriváltjaival kapcsolatos megállapitások értelmében pedig a Λ' szerinti derivált mátrix egyenlő a $\lambda_{k,l}$ elemek szerinti deriváltakból képzett mátrixszal.

Ha φ mind X, mind Λ szerint parciálisan deriválható, akkor a feltételes szélsőérték helyén φ-nek mind X, mind Λ szerinti parciális derivált mátrixai zérus mátrixok.

MELLÉKLETEK

M.1 A Péti Nitrogénmüvek Ammónia-2 gyáregységének mérleghiba kiegyenlitése

Részlet a

MTA Automatizálási Kutató Intézetének

"A Péti Nitrogénmüvek optimalizáló irányitása,
III. /1968/"

cimü jelentéséből*.

---

* A Péti Nitrogénmüvek hozzájárulásával

3. AZ ÜZEMI ANYAGMÉRLEG SZÁMITÁS

3.1. Bevezetés

Kidolgoztuk az üzemi anyagmérleg számitásának egy olyan algoritmusát, amely az összes rendelkezésre álló mérési adatot felhasználva a mérési hibákat optimálisan kiegyenliti és megadja a legvalószinübb olyan anyagmérleget, amely a megmaradási törvényeket tökéletesen kielégiti. E szerint a módszer szerint előkészitettük a teljes gázelőállitás - szintézis rendszernek egyesitett anyagmérleg számitását és próbaszámitásokkal ellenőriztük annak helyességét. A program ALGOL nyelven teljesen elkészült, és az üzemellenőrző DAMAST programokba beépitettük. A mérési eredmények alapján az egyes mért mennyiségek legvalószinűbb értékének azokat a korrigált értékeket tekintjük, amelyekre egyrészt teljesülnek a szóbanforgó mennyiségek közötti összefüggések /pl. anyagmegmaradási, energiamegmaradási egyenletek/ másrészt a szükséges korrekció a lehető legkisebb. A $\Delta \mathbf{x}$ korrekció mértékének a

$$\|\Delta \mathbf{x}\| = \sqrt{\sum_i (\Delta x_i / \tau_i)^2}$$

mennyiséget tekintjük, ahol τ_i az egyes mérések szórása. A teljesitendő összefüggések a mérteken (x_i) kivül tartalmazhatnak olyan mennyiségeket (y_i) is, amelyekre mérési eredmény nem áll rendelkezésre, s amelyeknek az értékét a program a korrekcióval egyidejüleg határozza meg. Az egyenletek

$$c_i + \sum_j a_{ij} x_j + \sum_j b_{ij} y_j + \sum_j \sum_k e_{ijk} x_j x_k + \sum_j \sum_k f_{ijk} y_j x_k = 0$$

alakuak lehetnek, azaz a mért ill. a számitandó mennyiségekben lineáris tagokon kivül akár a mért mennyiségeknek, akár a mért és a számitandó mennyiségeknek szorzatai is szerepelhetnek, valamint szerepelhet az egyenletekben konstans tag is. A feladat egyértelmü megoldhatóságának feltétele az, hogy a mért ill. a számitandó mennyiségek száma ("a" ill. "b"), valamint a teljesitendő egyenletek száma (n) között a

$$b < n < a+b$$

egyenlőtlenség fennálljon.

3.2. Az anyagmérleg számitás elvi alapjai, a számitás menete és az adatszalagkészitési utasitás

3.2.1. Elvi alapok

Legyen a korrigált mérési eredmények vektora

$$\underline{z} = \underline{x} + \Delta \underline{x},$$

s irjuk a teljesitendő egyenleteinket vektor ill. mátrix jelölés felhasználásával

$$q_j = \underline{a}_j^T \underline{z} + \underline{b}_j^T \underline{y} + \underline{z}^T \underline{\underline{E}}_j \underline{z} + \underline{y}^T \underline{\underline{F}}_j \underline{z} + c_j = 0 \qquad (1)$$

alakba $(j=1,2,\ldots,n)$

Feladatunk adott $\underline{x}$ mérési eredményekhez olyan $\underline{z}$ és $\underline{y}$ meghatározása, amellyel egyrészt teljesülnek az (1) egyenletek, másrészt a $\Delta \underline{x} = \underline{z} - \underline{x}$ korrekcióra a

$$\|\Delta \underline{x}\|^2 = \Delta \underline{x}^T P^{-1} \Delta \underline{x}$$

minimális, ahol P a mérések szórásnégyzetéből képzett diagonál mátrix. A keresett $\Delta \underline{x}$ és $\underline{y}$ vektorokat a Lagrange multiplikátor módszerrel képezett

$$\Psi = \frac{1}{2} \Delta \underline{x}^T P^{-1} \Delta \underline{x} + \underline{k}^T \underline{q}$$

függvény szélsőértékhelye szolgáltatja, ahol $\underline{q}$ a q_j mennyiségekből képzett vektor. A Ψ függvény szélsőértékhelyét a

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial \Delta \underline{x}} &= P^{-1} \Delta \underline{x} + \left(\frac{\partial \underline{q}}{\partial \Delta \underline{x}}\right) \underline{k} = 0 \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{y}} &= \left(\frac{\partial \underline{q}}{\partial \underline{y}}\right) \underline{k} = 0 \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{k}} &= \underline{q} = 0 \end{aligned}\right\} \qquad (2)$$

másodfoku egyenletrendszer megoldásával nyerhetjük.

Az egyenletrendszer megoldását iterációs uton végezzük el, s az egyes lépésekben felhasználunk egy olyan eljárást, mely a lineáris anyagmérleg egyenletek $\left(\underline{E}_k = 0,\ \underline{F}_k = 0\right)$ esetében a feladat megoldását szolgáltatja. A lineáris feltételi egyenletek esetében az $\underline{a}_j^T$, $\underline{b}_j^T$ sorvektorokból képezett

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} \underline{a}_1^T \\ \vdots \\ \underline{a}_n^T \end{bmatrix} \qquad \underline{\underline{B}} = \begin{bmatrix} \underline{b}_1^T \\ \vdots \\ \underline{b}_n^T \end{bmatrix}$$

mátrixok és a $\underline{c} = \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$ vektor segitségével az (1) egyenletrendszer

$$\underline{\underline{A}}\underline{z} + \underline{\underline{B}}\underline{y} + \underline{c} = 0 \qquad (1')$$

alakba irható, s ennek megfelelően (2)

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \Delta \underline{x}} = \underline{\underline{P}}^{-1} \Delta \underline{x} + \underline{\underline{A}}^T \underline{k} = 0$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \underline{y}} = \underline{\underline{B}}^T \cdot \underline{k} = 0 \qquad (2')$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \underline{k}} = \underline{\underline{A}}\underline{x} + \underline{\underline{A}}\Delta \underline{x} + \underline{\underline{B}}\underline{y} + \underline{c} = 0$$

alaku lesz. Az ily módon felirt /összesen a+b+n/ ismeretlenes egyenletrendszer megoldása gépidő és memóriakapacitás szempontjából tulságosan igényes volna. A mátrixok részekre bontásával gazdaságosabb megoldás nyerhető. Az n >b feltétel miatt képezhető az $\underline{\underline{A}}$, $\underline{\underline{B}}$ és $\underline{k}$-nak felbontása.

$$\underset{na}{\underline{\underline{A}}} = \begin{bmatrix} \underset{ba}{A_1} \\ \underset{n-ba}{A_2} \end{bmatrix} \qquad \underset{nb}{\underline{\underline{B}}} = \begin{bmatrix} \underset{bb}{B_1} \\ \underset{n-bb}{B_2} \end{bmatrix}, \qquad \underset{n1}{\underline{k}} = \begin{bmatrix} \underset{b1}{k_1} \\ \underset{n-b1}{k_2} \end{bmatrix}$$

Amennyiben a B mátrix tartalmaz b számu lineárisan független sort /ellenkező esetben az egyenletrendszer nem tartalmaz elegendő információt b számu y_i meghatározásához/, az általánosság megszoritása nélkül feltehetjük, hogy a B1 mátrix nem szinguláris, s ezért (2')-ből

$$\underline{\underline{B}}^T\underline{k} = \underline{\underline{B}}1^T\,\underline{k1} + \underline{\underline{B}}2^T\underline{k2} = 0$$

ahonnal

$$\underline{k1} = -\left(\underline{\underline{B}}1^T\right)^{-1}\underline{\underline{B}}2^T\underline{k2},$$

valamint

$$\underline{\underline{P}}^{-1}\Delta\underline{x} + \underline{\underline{A}}^T1\,\underline{k1} + \underline{\underline{A}}2\cdot\underline{k2} = 0$$

és igy

$$\underline{\underline{P}}^{-1}\Delta\underline{x} - \underline{\underline{A}}1^T\left(\underline{\underline{B}}1^T\right)^{-1}\underline{\underline{B}}2^T\underline{k2} + \underline{\underline{A}}2^T\cdot\underline{k2} = 0$$

$$\Delta\underline{x} = \underline{\underline{P}}\left(\underline{\underline{A}}1^T\left(\underline{\underline{B}}1^T\right)^{-1}\underline{\underline{B}}2^T - \underline{\underline{A}}2^T\right)\underline{k2}$$

A $\Delta\underline{x}$ ismeretében az $\underline{y}$ meghatározása

$\underline{\underline{A}}\underline{x} + \underline{\underline{A}}\Delta\underline{x} + \underline{\underline{B}}\underline{y} + \underline{c} = 0$ -ból történhet

$$\underline{\underline{A}}\underline{x} + \underline{c} = -\underline{\underline{A}}\underline{\underline{P}}\left(\underline{\underline{A}}1^T(B1^T)^{-1}\underline{\underline{B}}2^T - \underline{\underline{A}}2^T\right)\underline{k2} - \underline{\underline{B}}\underline{y} =$$

$$= -\left[\underline{\underline{A}}\underline{\underline{P}}\left(\underline{\underline{A}}1^T\left(\underline{\underline{B}}1^T\right)^{-1}\underline{\underline{B}}2^T - \underline{\underline{A}}2^T\right),\ \underline{\underline{B}}\right]\begin{bmatrix}\underline{k2}\\ \underline{y}\end{bmatrix} = -\underline{\underline{M}}\begin{bmatrix}\underline{k2}\\ \underline{y}\end{bmatrix}$$

ahol $\underline{\underline{M}}$ a zárójelben levő két mátrix egymásmellé irásával nyert nxn-es mátrix, s igy

$$\begin{bmatrix}\underline{k2}\\ \underline{y}\end{bmatrix} = -\underline{\underline{M}}^{-1}\left(\underline{\underline{A}}\underline{x} + \underline{c}\right)$$

A másodfoku tagokat is tartalmazó általános eset megoldásához tekintsük az (1) egyenletnek lineáris közelitését valamely $\underline{z}^{(i)} = \underline{X} + \Delta\underline{x}^{(i)}$, $y^{(i)}$ pontban.

$$l_j^{(i)} = \left(\underline{a}_j^T + \underline{y}^{T(i)}\underline{\underline{F}}_j + 2\underline{z}^{T(i)}\underline{\underline{E}}_j\right)\underline{z} + \left(\underline{b}_j^T + \underline{z}^{T(i)}\underline{\underline{F}}^T\right)\underline{y} + \qquad (1')$$

$$c_j\ \underline{z}^{T(i)}\underline{\underline{F}}_j\underline{z}^{(i)} - \underline{z}^{T(i)}\underline{\underline{F}}^T\underline{y}^{(i)} = 0$$

Könnyen ellenőrizhető, hogy valóban

$$\underline{q}^{(i)} = \underline{q}\left(\underline{z}^{(i)},\ \underline{y}^{(i)}\right) = \underline{l}\left(\underline{z}^{(i)},\ \underline{y}^{(i)}\right) = \underline{l}^{(i)}$$

$$\left(\frac{\partial \underline{q}}{\partial \underline{\Delta x}}\right)^{(i)} = \left(\frac{\partial \underline{q}}{\partial \underline{z}}\right)^{(i)} = \left(\frac{\partial \underline{l}}{\partial \underline{z}}\right)^{(i)} \qquad (3)$$

$$\left(\frac{\partial \underline{q}}{\partial \underline{y}}\right)^{(i)} = \left(\frac{\partial \underline{l}}{\partial \underline{y}}\right)^{(i)}$$

Az (1) egyenletrendszer az

$$\underline{a}_j^{T(i)} = \underline{a}_j^T + \underline{y}^{T(i)}\underline{\underline{F}}_j + 2\underline{z}^{T(i)}\underline{\underline{E}}_j$$

$$\underline{b}_j^{T(i)} = \underline{b}_j^T + \underline{z}^{T(i)}\underline{\underline{F}}^T$$

$$\underline{d}_j^{(i)} = c_j - \underline{z}^{T(i)}\underline{\underline{F}}_j^T\,\underline{y}^{(i)} - \underline{z}^{T(i)}\underline{\underline{E}}_j\underline{z}^{(i)}$$

jelölésekkel

$$\underline{a}_j^{T(i)}\underline{z} + \underline{b}_j^{T(i)} + c_j = 0$$

alakban irható. Ezen lineáris feladat megoldásaként nyert

$$\underline{\Delta x}^{(i+1)} \qquad \underline{y}^{(i+1)}$$

a keresett $\underline{x}$ és y ujabb közelitésnek tekinthető.

Amennyiben az eljárás konvergens, azaz

$$\underline{z}^{(i)} \longrightarrow \underline{z}^{*}, \qquad \underline{y}^{(i)} \longrightarrow \underline{y}^{*}$$

ugy $\underline{y}^*$, $\underline{z}^*$ a (2) egyenletrendszer megoldását szolgáltatja, amint ez könnyen belátható, ha tekintetbe vesszük azt, hogy $\underline{y}^{(i)}$, $\underline{z}^{(i)}$-vel együtt mind az $l_j^{(i)}(\underline{z},\underline{y})$ függvények, mind pedig annak $\underline{z}$ ill. $\underline{y}$ szerinti deriváltjai konvergensek, s határértékük a /folytonos/ $q(\underline{z},\underline{y})$ függvény $\underline{y}^*,\underline{z}^*$ helyen vett lineáris közelitését adja. Az eljárás konvergenciájára egyedüli biztositék az, hogy a mért $\underline{x}$ értékek feltehetően nincsenek "messze" a keresett $\underline{z}$-től, s a lineáris közelitésen alapuló Newton-tipusu iterációs eljárások a gyök közelében általában gyorsan konvergálnak. Az iteráció kezdőértékeként

$$\Delta \underline{x}^{(1)} = \underline{0}, \qquad \underline{y}^{(1)} = \underline{y}^{\sim}$$

értekeket használjuk, ahol $\tilde{y}$ oly módon van meghatározva, hogy a

$$\sum_j q_j^2(\underline{x}, \tilde{\underline{y}})$$

kifejezés érték minimális legyen.

3.2.2. A számitás menete

A program - más célra történő felhasználás miatt - az (1) egyenletrendszer együtthatómátrixát, valamint a mért értékeket, s azok szórását a háttérmemóriába olvassa be, s azokat ott "petbal" néven reserválja. Az adatok beolvasása után - irógépről megválasztható módon - elvégzi az egyenletek lineáris függetlenségének ellenőrzését, szükség esetén az egyenletek sorrendjét oly módon változtatja meg, hogy a B mátrix első b sora független legyen. Ezután a megoldást szolgáltató algoritmust hajtja végre mindaddig, amig az aktuális korrekció:

$$\|\Delta \underline{x}^{(i+1)} - \Delta \underline{x}^{(i)}\| > 10^{-3}$$

Az iteráció előrehaladásának ellenőrzése céljából a program minden lépésben irógépen kiirja az aktuális korrekció értékét. Ellenőrzési célokra a KA gomb benyomására minden iterációs lépésben kiirja az $\underline{x}$ és $\underline{y}$ értékek legutóbbi közelitését, a KB gomb benyomása esetében pedig a megoldás során kiszámitott mátrixokat.

3.2.3. Adatszalagkészitési utasitás

A program adatszalagja rendre az alábbiakat tartalmazza:

[tetszőleges, legf. 20 jelből álló "]" -t nem tartalmazó jelsorozat: a feladat azonositója

file	:	ügyszám
n	:	az egyenletek száma
a	:	a mért mennyiségek száma
an	:	a mért mennyiségekben másodfoku tagok száma
b	:	számitandó mennyiségek száma
bn	:	a számitandó és mért mennyiségek szorzatát tar-

talmazó tagok száma

A : a mért mennyiségek együtthatómátrixa /az első "a" oszlop a lineáris, az ezt követő "an" a nemlineáris tagok együtthatóit tartalmazza/
A mátrix minden sorába meg kell adni a nullától különböző együttható oszlopindexéből s a hozzá tartozó együtthatóból képezett számpárokat.
Egy-egy sor végén elhatárolójelként "e" betü áll.

B : a számitott mennyiségek együtthatói /az első "b" oszlop a lineáris, az azt követő "bn" a másodfoku tagok együtthatóit tartalmazza/. Az együtthatók megadása ugyanugy történik, mint A-nál.

C : a konstans tagokat tartalmazó n-elemü számsorozat
Az utolsó szám után elhatárolójelként "e" betü áll

nla : az A mátrix utolsó an számu oszlopához tartozó $x_i x_j$ tagok i,j, indexpárjainak sorozata

X : a mért mennyiségek /a-elemü/ sorozata. Az utolsó szám után elhatárolójelként "e" betü áll.

P : a mért mennyiségek szórásának a-elemü sorozata

ε : az egyenletrendszer szingularitásának mértéke. Javasolt érték az együtthatók nagyságrendjének 10^{-5}-szerese.

A részletes programot a 3.2. melléklet tartalmazza.*

3.3. A péti ammónia üzem anyagmérleg-számitása

3.3.1. Az egyenletek felállitásának alapelvei

A mindkét nyersanyagváltozatra összeállitott anyagmérlegek az üzem belépő nyersanyagtol /benzin vagy gáz/ cseppfolyós ammóniáig terjedő részét tartalmazzák. Benzin alapu üzemelés esetén a 7912/D/1000/1 és a 7912/D/1000/3 számu, gáz alapu üzemelés esetén a 7912/D/1000/2 és a 7912/D/1000/3 számu Simon Carves tervezési folyamatábrákat vettük alapul.

Az anyagmérlegek kiindulási adatait a data-logger mért

* A hivatkozás az eredeti anyag mellékletére vonatkozik, ami az értekezés mellékletei között nem szerepel.

pontjaiból állitottuk össze. Ezek a kiindulási adatok részben közvetlenül a data-logger pont értékét kapják, részben néhány data-logger pont alapján explicit képlettel számolódnak. Ezek az előzetesen számitott pontok megkönnyitik a mérlegek felállitását, csökkentik az ismeretlenek számát és a mérlegekben az egyéb kiindulási adatokkal megegyező módon használjuk fel őket. Ilyen előzetesen számitott pont például a cseppfolyós ammóniában oldott szintezisgáz, amihez felhasználjuk a hőmérséklet és nyomásviszonyokat. Felirtuk az anyagmérleg érvényességi határai között előforduló alapvető reakciókat, melyek mindkét nyersanyagbázist kielégitik. Megvizsgáltuk ezen reakciók függetlenségét és ugy találtuk, hogy lineáris kombinációjukkal valamennyi anyagmérleget érintő reakció képezhető. A reakcióegyenleteket a 3.1 táblázat tartalmazza. Az üzemet technológiai egységekre bontottuk. A felbontás alapja a felirt rész-mérlegek érvényességi köre volt. A 3.1 táblázat reakcióegyenletei is követik azt a felbontást, melyet egyszerüsitett formában a 3.1 ábra mutat be. Az ábrán szereplő körök a mérlegek és a technológia találkozási pontjai, vagyis minden kör egy anyagáram vektort jelent. Ezeknek a vektoroknak csak valamelyik eleme Nm³/óra mértékegységü mennyiség, melyek részben mért /data-logged/ részben az anyagmérleggel számitott értékek lehetnek.

A pontok jelentése a következő:

1./ Technológiai szénhidrogén /nyersanyag/

2./ A cseppfolyós szénhidrogén kéntelenitésére visszavezetett szintézisgáz /értéke gáz nyersanyag esetén = 0/

3./ Technológiai gőz

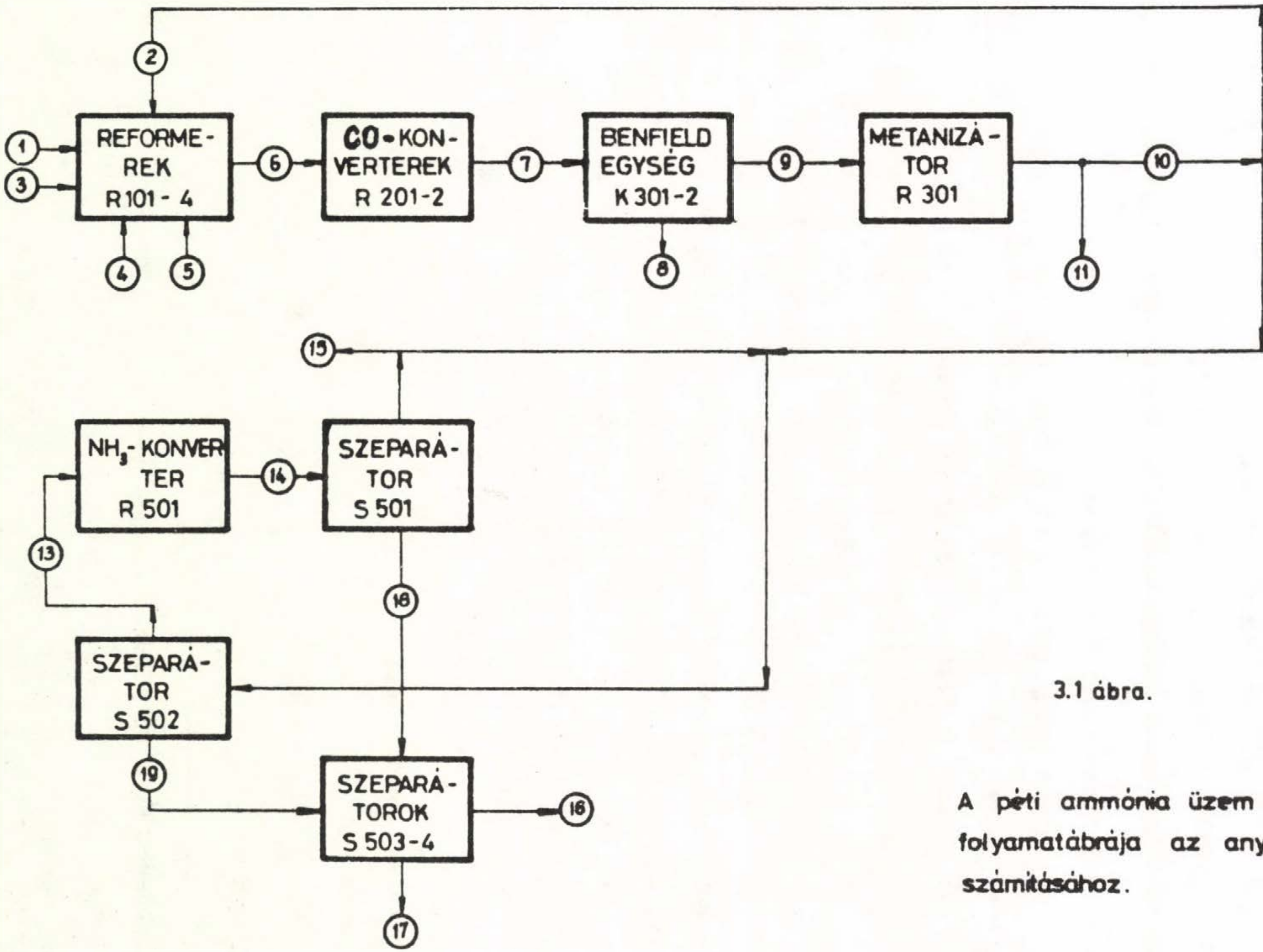
4./ Technológiai levegő

5./ Quench viz

6,7,9./ közbenső anyagáramok

8./ Az eltávolitott CO_2

10./ Szintézisgáz /összes termelt/



3.1 ábra.

A péti ammónia üzem egyszerűsített folyamatábrája az anyagmérlegek számításához.

11./ A gázelőállitó részből eltávolitott viz

12./ Szintézisgáz /valódi, szintézisre használt/

13-14./ Az ammónia konverter belépő és kilépő árama

15./ Lefujt gáz

16./ A cseppfolyós ammóniában oldott szintézisgáz

17./ A termelt cseppfolyós ammónia /összes/

18-19./ A szintéziskörben leválasztott cseppfolyós ammónia

A jelölések a 3.1 ábrán és a következő táblázatokban:

F_k - a k-ik áram mennyisége /Nm³/óra/

$F_{j,k}$ - a j anyag mennyisége a k-ik áramban /Nm³/óra/

$x_{j,k}$ - a j anyag moltörtje a k-ik áramban

Valamennyi x érték száraz gázra vonatkozik az $x'_{H_2O,6}$ kivételével, mivel az a 6. áramban levő viz moltörtet jelenti /értéke a tervezési folyamatábrán szereplő adat, és az együttható mátrixban konstansként szerepel/

j - a következő anyagokat jelölheti: NH_3, H_2, N_2, A, CH_4, CO, CO_2, H_2O

Az egyenletek zárójelben levő értékei moltörteket jelölnek és az együttható mátrixban állandóként szerepelnek.

3.1 Táblázat

Alapvető reakcióegyenletek:

A reformerekben

1./ $CH_a + \frac{4-a}{2} H_2 \longrightarrow CH_4$ (N'_1)

2./ $CH_4 + H_2O \longrightarrow CO + 3H_2$ (N'_2)

4./ $CH_4 + 2O_2 \longrightarrow CO_2 + 2H_2O$ (N'_4)

A reformerekben és a CO-konverterekben

3./ $CO + H_2O \longrightarrow CO_2 + H_2$ (N'_3)

A metanizátorban

5./ $CO + 3H_2 \longrightarrow CH_4 + H_2O$ (N'_5)

6./ $CO_2 + 4H_2 \longrightarrow CH_4 + 2H_2O$ (N'_6)

Az ammónia konverterben

7./ $N_2 + 3H_2 \longrightarrow 2\,NH_3$ $\qquad (N'_7)$

Ahol: N'_i - az i-ik reakcióban elreagált anyagnak az aktuális sztöchiometriai együtthatójával osztott mennyiségét jelenti.

3.3.2. A mérlegegyenletek

A felsorolt elvek alapján felállitottuk a mérlegeket gáz és benzin nyersanyag-változatokra.

3.3.2.1. Benzin alapanyag felhasználásával a következő egyenleteket kaptuk

Vegyület mérlegek:

$[H_2]$ $-2N'_1+3N'_2+N'_3+0,5a \cdot N'_1-3F_{CO,7}-4F_{CO_2,9}+F_{H_2,2}-F_{10} \cdot x_{H_2,10}=0$

$F_{H_2,13}+F_{H_2,15}+F_{H_2,16}-F_{10} \cdot x_{H_2,10}-F_{H_2,14}+F_{H_2,2} = 0$

$-3N'_7+F_{H_2,13}-F_{H_2,14} = 0$

$[N_2]$ $F_{N_2,2}+F_4(x_{N_2,4})-F_{N_2,10} = 0$

$F_{13} \cdot x_{N_2,13}-F_{N_2,10}-F_{N_2,14}+F_{N_2,15}+F_{N_2,16}+F_{N_2,2} = 0$

$-N'_7+F_{13} \cdot x_{N_2,13}-F_{N_2,14} = 0$

$[NH_3]$ $F_{13} \cdot x_{NH_3,13}+F_{15} \cdot x_{NH_3,15}+F_{NH_3,18}+F_{NH_3,19}-F_{14} \cdot x_{NH_3,14}=0$

$2N'_7+F_{13} \cdot x_{NH_3,13}-F_{14} \cdot x_{NH_3,14} = 0$

$F_{NH_3,18}+F_{NH_3,19}-F_{NH_3,17}-F_{NH_3,16} = 0$

$[CO]$ $F_{CO,7}-F_{Sz,7} \cdot x_{CO,7} = 0$

$N'_3-N'_2+F_{CO,7} = 0$

$[CO_2]$ $N'_3+N'_4+F_4(x_{CO_2,4})-F_{CO_2,8}-F_{CO_2,9} = 0$

$F_{CO_2,9}-F_{Sz,7} \cdot x_{CO_2,9}+F_{CO_2,8} \cdot x_{CO_2,9} = 0$

$[A]$ $F_{A,2}+F_4(x_{A,4})-F_{A,10} = 0$

$F_4(x_{A,4})-F_{A,15}-F_{A,16} = 0$

34

$[CH_4]$ $N_1' - N_2' - N_4' + F_{CH_4,2} - F_{CH_4,6} = 0$

$F_{CH_4,6} + F_{CO,7} + F_{CO_2,9} - F_{CH_4,10} = 0$

$F_{CH_4,6} - F_6 \ast x_{CH_4,6}(1 - x'_{H_2O,6}) = 0$

$F_{CH_4,10} - F_{CH_4,2} - F_{CH_4,15} - F_{CH_4,16} = 0$

$[O_2]$ $-2N_4' + F_4(x_{O_2,4}) = 0$

$[H_2O]$ $-N_2' - N_3' + 2N_4' + F_{H_2O,3} + F_{H_2O,5} + F_{CO,7} + 2F_{CO_2,9} - F_{H_2O,11} = 0$

Komponens mérlegek:

$[F_2]$ $F_{H_2,2} + F_{N_2,2} + F_{A,2} + F_{CH_4,2} - F_2 = 0$

$[F_6]$ $-N_1' + 2N_2' + 0,5a \ast N_1' + F_2 + F_{H_2O,3} + F_{H_2O,5} + F_4 - F_6 = 0$

$[F_{Sz,7}]$ $F_6 - F_{Sz,7} - F_{H_2O,11} - 2F_{CO_2,9} - 2F_{CO,7} = 0$

$[F_{10}]$ $F_{N_2,10} + F_{A,10} + F_{CH_4,10} - F_{10} + F_{10} \ast x_{H_2,10} = 0$

$[F_{13}]$ $F_{H_2,13} + F_{13} \ast x_{N_2,13} + F_{13} \ast x_{A,13} + F_{13} \ast x_{NH_3,13} + F_{13} \ast x_{CH_4,13} -$

$- F_{13} = 0$

$[F_{14}]$ $F_{H_2,14} + F_{N_2,14} + F_{13} \ast x_{A,13} + F_{13} \ast x_{CH_4,13} + F_{14} \ast x_{NH_3,14} - F_{14} = 0$

$[F_{15}]$ $F_{H_2,15} + F_{N_2,15} + F_{A,15} + F_{CH_4,15} + F_{15} \ast x_{NH_3,15} - F_{15} = 0$

$[F_{16}]$ $F_{H_2,16} + F_{N_2,16} + F_{CH_4,16} + F_{A,16} + F_{NH_3,16} - F_{16} = 0$

Arányossági korlátozók

$[H_2]$ $F_{15} \ast F_{H_2,14} - F_{14} \ast F_{H_2,15} + F_{NH_3,18} \ast F_{H_2,15} = 0$

$[N_2]$ $F_{15} \ast F_{N_2,14} - F_{14} \ast F_{N_2,15} + F_{NH_3,18} \ast F_{N_2,15} = 0$

$[H_2]$ $F_{H_2,2} - F_2 \ast x_{H_2,10} = 0$

$[A]$ $F_{A,2} \ast F_{10} - F_{A,10} \ast F_2 = 0$

$[CH_4]$ $F_{CH_4,2} \ast F_{10} - F_{CH_4,10} \ast F_2 = 0$

Az egyenletek alapján elkészitett együttható matrix a 3.2 ábrán látható.

Az A mátrix együtthatói

Egyenl. száma	a	N_i'	$F_{H_2O,5}$	$F_{H_2O,3}$	F_4	$F_{CO_2,8}$	F_{10}	$X_{N_2,10}$	$X_{CH_4,6}$	$X_{CO,7}$	$X_{CO_2,8}$	$F_{NH_3,10}$	$F_{NH_3,10}$	F_{15}	F_{16}	F_{18}	$F_{NH_3,17}$	$F_{N_2,14}$	$F_{N_2,18}$	$F_{A,18}$	$F_{CH_4,18}$	$X_{NH_3,14}$	$X_{N_2,13}$	$X_{A,18}$	$X_{CH_4,13}$	$X_{NH_3,14}$	$X_{NH_3,18}$	$F_{NH_3,19}$	F_2
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
1		-2																											
2																		1											
3																													
4					X_{N_2}																								
5																			1										
6																													
7												1	1																
8																													
9												1	1				-1											-1	
10																													
11																													
12					X_{CO_2}	-1																							
13																													
14					X_A																								
15					X_s															-1									
16		1																											
17																													
18																													
19																					-1								
20					X_{O_2}																								
21			1	1																									
22																													-1
23		-1	1	1	1																								1
24																													
25							-1																						
26																													
27														-1															
28															-1														
29																-1		1	1	1	1							1	
30																													
31																													
32																													
33																													
34																													

nemlineáris A elemek

Egyenl. száma	$a \cdot N_i'$	$F_{CO_2,8} \cdot X_{CO_2,8}$	$F_{10} \cdot X_{N_2,10}$	$F_{14} \cdot N_{N_2,14}$	$F_{13} \cdot X_{NH_3,13}$	$F_8 \cdot X_{N_2,10}$
	1,2 30	6,11 31	7,8 32	14,28 33	15,27 34	29,8 35
1	0,5		-1			
2			-1			
3						
4						
5						
6						
7				-1	1	
8				-1		
9						
10						
11						
12						
13		1				
14						
15						
16						
17						
18						
19						
20						
21						
22						
23	0.5					
24						
25			1			
26						
27				1		
28					1	
29						
30						
31						
32						-1
33						
34						

A B mátrix együtthatói

Egyenl. száma	N_5'	N_5'	N_6'	F_6	$F_{CH_4,6}$	$F_{N_2,7}$	$F_{CO,7}$	$F_{CO_2,8}$	$F_{N_2,10}$	$F_{CH_4,10}$	$F_{H_2O,11}$	F_{13}	$F_{N_2,14}$	$F_{N_2,14}$	$F_{NH_3,14}$	$F_{N_2,17}$	$F_{N_2,18}$	$F_{A,18}$	$F_{CH_4,18}$	N_7'	$F_{A,10}$	$F_{N_2,2}$	$F_{N_2,2}$	$F_{A,2}$	$F_{CH_4,2}$
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25
1	3	1					-3	-1														1			
2													1	-1		+1						1			
3													1	-1						-3					
4									-1														1		
5									-1						-1		1						1		
6															-1					-1					
7																									
8																				2					
9																									
10							1																		
11	-1	1					1																		
12		1	1					-1																	
13								1																	
14																					-1			1	
15																		-1							
16	-1		-1		-1																				1
17					1		1	1		-1															
18					1																				
19										1									-1						-1
20			-2																						
21	-1	-1	2				1	2			-1														
22																						1	1	1	1
23	2			-1																					
24				1		-1	-2	-2			-1														
25									1	1											1				
26												-1	1												
27														1	1										
28																1	1	1	1						
29																									
30																									
31																									
32																						1			
33																									
34																									

nemlineáris B elemek

Egyenl. száma	$F_8 \cdot X_{CH_4,5}$	$F_{N_2,7} \cdot X_{CO,7}$	$F_{N_2,7} \cdot X_{CO_2,8}$	$F_{CH_4,10} \cdot F_8$	$F_{13} \cdot X_{NH_3,10}$	$F_{13} \cdot X_{N_2,13}$	$F_{13} \cdot X_{A,13}$	$F_{13} \cdot X_{CH_4,13}$	$F_{N_2,14} \cdot F_{16}$	$F_{N_2,14} \cdot F_{18}$	$F_{N_2,15} \cdot F_{NH_3,18}$	$F_{N_2,15} \cdot F_{14}$	$F_{N_2,15} \cdot F_{NH_3,10}$	$F_{N_2,15} \cdot F_{14}$	$F_{A,10} \cdot F_8$	$F_{A,8} \cdot F_{10}$	$F_{CH_4,8} \cdot F_{10}$
	4,9 26	6,10 27	6,11 28	10,29 29	12,22 30	12,23 31	12,24 32	12,25 33	14,15 34	15,15 35	16,12 36	16,14 37	17,12 38	17,14 39	21,29 40	24,7 41	25,7 42
1																	
2																	
3																	
4																	
5						1											
6						1											
7					1												
8					1												
9																	
10		-1															
11																	
12																	
13			-1														
14																	
15																	
16																	
17																	
18	$-1+X_{H_2O}$																
19																	
20																	
21																	
22																	
23																	
24																	
25																	
26					1	1	1	1									
27							1	1									
28																	
29																	
30									1		1	-1					
31										1			1	-1			
32																	
33															-1	1	
34				-1													1

3.2 ábra

3.3.2.2. Gáz alapanyag felhasználásával a következő egyenleteket kaptuk

Vegyület mérlegek:

$\boxed{H_2}$

$$-2\dot{N}_1+3\dot{N}_2+\dot{N}_3+0{,}5a\dot{N}_1-3F_{CO,7}-4F_{CO_2,9}-F_{10}x_{H_2,10}=0$$

$$F_{H_2,13}+F_{H_2,15}+F_{H_2,16}-F_{10}x_{H_2,10}-F_{H_2,14}=0$$

$$-3\dot{N}_7+F_{H_2,13}-F_{H_2,14}=0$$

$\boxed{N_2}$

$$F_{N_2,1}+F_4(x_{N_2,4})-F_{N_2,10}=0$$

$$F_{13}x_{N_2,13}-F_{N_2,10}-F_{N_2,14}+F_{N_2,15}+F_{N_2,16}=0$$

$$-\dot{N}_7+F_{13}x_{N_2,13}-F_{N_2,14}=0$$

$\boxed{NH_3}$

$$F_{13}x_{NH_3,13}+F_{15}x_{NH_3,15}+F_{NH_3,18}+F_{NH_3,19}-F_{14}x_{NH_3,14}=0$$

$$2\dot{N}_7+F_{13}x_{NH_3,13}-F_{14}x_{NH_3,14}=0$$

$$F_{NH_3,18}+F_{NH_3,19}-F_{NH_3,17}-F_{NH_3,16}=0$$

$\boxed{CO}$

$$F_{CO,7}-F_{Sz,7}x_{CO,7}=0$$

$$\dot{N}_3-\dot{N}_2+F_{CO,7}=0$$

$\boxed{CO_2}$

$$\dot{N}_3+\dot{N}_4+F_4(x_{CO_2,4})-F_{CO_2,8}-F_{CO_2,9}+F_{CO_2,1}=0$$

$$F_{CO_2,9}-F_{Sz,7}x_{CO_2,9}+F_{CO_2,8}x_{CO_2,9}=0$$

$\boxed{A}$

$$F_4(x_{A,4})-F_{A,15}-F_{A,16}=0$$

$\boxed{CH_4}$

$$\dot{N}_1-\dot{N}_2-\dot{N}_4-F_{CH_4,6}=0$$

$$F_{CH_4,6}+F_{CO,7}+F_{CO_2,9}-F_{CH_4,10}=0$$

$$F_{CH_4,6}-F_6x_{CH_4,6}(1-x_{H_2O,6})=0$$

$$F_{CH_4,10}-F_{CH_4,15}-F_{CH_4,16}=0$$

$\boxed{O_2}$

$$-2N_4+F_4(x_{O_2,4})=0$$

$\boxed{H_2O}$

$$-\dot{N}_2-\dot{N}_3+2\dot{N}_4+F_{H_2O,5}+F_{H_2O,3}+F_{CO,7}+F_{CO_2,9}-F_{H_2O,11}=0$$

Az A mátrix együtthatói (1–16)

Egyenletek sorsz.	1: a	2: N'_1	3: $F_{H_2O,6}$	4: $F_{H_2O,3}$	5: F_4	6: $F_{CO_2,8}$	7: F_{10}	8: $X_{H_2,10}$	9: $X_{CH_4,8}$	10: $X_{CO,7}$	11: $X_{CO_2,8}$	12: $F_{NH_3,18}$	13: $F_{NH_3,19}$	14: F_{14}	15: F_{15}	16: F_{16}
1		-2														
2																
3																
4					X_{N_2}											
5																
6																
7												-1	-1			
8																
9												1	1			
10																
11																
12																
13																
14					X_{CO_2}	-1										
15																
16					X_A											
17		1														
18																
19																
20																
21					X_{O_2}											
22			1	1												
23		-1														
24		+2	-1	-1	-1											
25																
26					X_A		-1									
27																
28														+1		
29															-1	
30																-1

Az A mátrix együtthatói (17–31)

Egyenletek sorsz.	17: $F_{NH_3,17}$	18: $F_{H_2,18}$	19: $F_{N_2,16}$	20: $F_{A,16}$	21: $F_{CH_4,16}$	22: $X_{NH_3,13}$	23: $X_{N_2,13}$	24: $X_{A,13}$	25: $X_{CH_4,13}$	26: $X_{NH_3,14}$	27: $X_{NH_3,15}$	28: $F_{NH_3,16}$	29: F_1	30: $F_{CO_2,1}$	31: $F_{N_2,1}$
1															
2		-1													
3															
4															1
5			-1												
6															
7															
8															
9	-1											-1			
10															
11															
12															
13															
14														1	
15															
16				-1											
17															
18															
19															
20					-1										
21															
22															
23													1	-1	-1
24													-1		
25															
26															
27															
28															
29															
30		1	1	1	1							1			

nemlineáris A elemek

Egyenletek sorsz.	$a \cdot N'_1$ (1, 2; 32)	$F_{CO_2,8} \cdot X_{CO_2,9}$ (6, 11; 33)	$F_{10} \cdot X_{H_2,10}$ (7, 8; 34)	$F_{14} \cdot X_{NH_3,14}$ (14, 26; 35)	$F_{15} \cdot X_{NH_3,15}$ (15, 27; 36)
1	0.5		-1		
2			+1		
3					
4					
5					
6					
7				+1	-1
8				-1	
9					
10					
11					
12					
13					
14					
15		1			
16					
17					
18					
19					
20					
21					
22					
23					
24	-0.5				
25					
26			1		
27					
28				-1	
29					1
30					

A B mátrix együtthatói (1–10)

Egyenletek sorsz.	1: N'_2	2: N'_3	3: N'_4	4: F_6	5: $F_{CH_4,6}$	6: $F_{Sz,7}$	7: $F_{CO,7}$	8: $F_{CO_2,8}$	9: $F_{H_2,10}$	10: $F_{CH_4,10}$
1	3	1					-3	-4		
2										
3										
4									-1	
5									+1	
6										
7										
8										
9										
10										
11										
12							1			
13	1	-1					-1			
14		1	1					-1		
15								1		
16										
17	-1		-1		-1					
18					1		1	1		-1
19					1					
20										1
21			-2							
22	-1	-1	2				1	1		
23										
24	-2			+1						
25				1		-1	-2	-2		
26									1	1
27										
28										
29										
30										

A B mátrix együtthatói (11–20)

Egyenletek sorsz.	11: $F_{H_2O,8}$	12: F_{13}	13: $F_{H_2,13}$	14: $F_{N_2,14}$	15: $F_{H_2,14}$	16: $F_{N_2,15}$	17: $F_{NH_3,15}$	18: $F_{A,18}$	19: $F_{CH_4,18}$	20: N'_7
1										
2			-1	+1		-1				
3			+1	-1						-3
4										
5					+1		-1			
6					-1					-1
7										
8										+2
9										
10										
11										
12										
13										
14										
15										
16								-1		
17										
18										
19										
20									-1	
21										
22	-1									
23										
24										
25	-1									
26										
27		-1	1							
28				-1	-1					
29										
30						1	1	1	1	

nemlineáris B elemek

Egyenletek sorsz.	$F_6 \cdot X_{CH_4,6}$ (4, 9; 21)	$F_{Sz,7} \cdot X_{CO,7}$ (6, 10; 22)	$F_{Sz,7} \cdot X_{CO_2,9}$ (6, 11; 23)	$F_{13} \cdot X_{NH_3,13}$ (12, 22; 24)	$F_{13} \cdot X_{N_2,13}$ (12, 23; 25)	$F_{13} \cdot X_{A,13}$ (12, 24; 26)	$F_{13} \cdot X_{CH_4,13}$ (12, 25; 27)	$F_{H_2,14} \cdot F_{18}$ (14, 15; 28)	$F_{N_2,14} \cdot F_{15}$ (15, 15; 29)	$F_{H_2,15} \cdot F_{NH_3,18}$ (16, 12; 30)	$F_{H_2,15} \cdot F_{14}$ (16, 14; 31)	$F_{N_2,15} \cdot F_{NH_3,18}$ (17, 12; 32)	$F_{N_2,15} \cdot F_{14}$ (17, 14; 33)
1													
2													
3													
4													
5					-1								
6					+1								
7				-1									
8				+1									
9													
10								1		1	-1		
11									1			1	-1
12		-1											
13													
14													
15			-1										
16													
17													
18													
19	$-1+X_{H_2O}$												
20													
21													
22													
23													
24													
25													
26													
27				1	1	1	1						
28						-1	-1						
29													
30													

3.3 ábra.

Komponens mérlegek:

$[F_1]$ $F_1 - N'_1 - F_{CO_2,1} - F_{N_2,1} = 0$

$[F_6]$ $F_1 + F_{H_2O,3} + F_{H_2O,5} + F_4 - 2N'_1 + 0,5a*N'_1 + 2N'_2 - F_6 = 0$

$[F_{Sz,7}]$ $F_6 - F_{Sz,7} - F_{H_2O,11} - 2F_{CO_2,9} - 2F_{CO,7} = 0$

$[F_{10}]$ $F_{10} * x_{H_2,10} + F_{N_2,10} + F_4(x_{A,4}) + F_{CH_4,10} - F_{10} = 0$

$[F_{13}]$ $F_{H_2,13} + F_{13} * x_{N_2,13} + F_{13} * x_{A,13} + F_{13} * x_{NH_3,13} + F_{13} * x_{CH_4,13} -$
$- F_{13} = 0$

$[F_{14}]$ $F_{H_2,14} + F_{N_2,14} + F_{13} * x_{A,13} + F_{13} * x_{CH_4,13} + F_{14} * x_{NH_3,14} - F_{14} = 0$

$[F_{15}]$ $F_{H_2,15} + F_{N_2,15} + F_{A,15} + F_{CH_4,15} + F_{15} * x_{NH_3,15} - F_{15} = 0$

$[F_{16}]$ $F_{H_2,16} + F_{N_2,16} + F_{CH_4,16} + F_{A,16} + F_{NH_3,16} - F_{16} = 0$

Arányossági korlátozók

$[H_2]$ $F_{15} * F_{H_2,14} - F_{14} * F_{H_2,15} + F_{NH_3,18} * F_{H_2,15} = 0$

$[N_2]$ $F_{15} * F_{N_2,14} - F_{14} * F_{N_2,15} + F_{NH_3,18} * F_{N_2,15} = 0$

Az egyenletek alapján elkészitett együttható mátrix a 3.3 ábrán látható.

3.3.3. A mért és számitott mennyiségek

Az egyenletekben felhasznált mért és előre számitott értékek a következők:

a; N'_1; $F_{H_2O,3}$; $F_{H_2O,5}$; F_4; $F_{CO_2,8}$; F_{10}; $x_{H_2,10}$; $x_{CH_4,6}$; $x_{CO,7}$; $x_{CO_2,9}$; $F_{NH_3,18}$; $F_{NH_3,19}$; F_{14}; F_{15}; F_{16}; $F_{NH_3,17}$; $F_{H_2,16}$; $F_{N_2,16}$; $F_{CH_4,16}$; $x_{NH_3,13}$; $x_{N_2,13}$; $x_{A,13}$; $x_{CH_4,13}$; $x_{NH_3,14}$;

$x_{NH_3,15}$; $F_{NH_3,16}$; mindkét nyersanyag esetén és F_2 naphta nyersanyag vagy F_1; $F_{CO_2,1}$; $F_{N_2,1}$; a gáz nyersanyag esetben.

Az egyenlettel számitott értékek a következők:

N'_2; N'_3; N'_4; F_6; $F_{CH_4,6}$; $F_{Sz,7}$; $F_{CO,7}$; $F_{CO_2,9}$; $F_{N_2,10}$; $F_{CH_4,10}$; $F_{H_2O,11}$; F_{13}; $F_{H_2,13}$; $F_{H_2,14}$; $F_{N_2,14}$; $F_{H_2,15}$; $F_{A,15}$;

$F_{CH_4,15}$;

$N_7^!$; mindkét nyersanyag esetén és $F_{A,10}$; $F_{H_2,2}$; $F_{N_2,2}$;

$F_{A,2}$; $F_{CH_4,2}$; a benzin felhasználása során.

Az előre számitott értékeket a következő képletek felhasználásával kaptuk:

3.3.3.1. A cseppfolyós ammóniában oldott gázok számítása: [4]

a./ $F_{H_2,16}:=q_{H_2}:=0,105+0,0007*(t-20)/p*q_{NH_3}$;

$F_{N_2,16}:=q_{N_2}:=0,122+0,00036*(t-20)/p*q_{NH_3}$;

$F_{A,16}:=q_A:=0,157+0,0004*(t-20)/p*q_{NH_3}$;

$F_{CH_4,16}:=q_{CH_4}:=0,26+($__if__ $t<20$ __then__ $0,0035$ __else__ $0,01)*(t-20)/p*q_{NH_3}$;

Ahol:

p - az aktuális parciális nyomás (atm)

t - az aktuális hőmérséklet (^oC)

q_{NH_3} - a cseppfolyós ammónia mennyisége (tonna)

q_{H_2} - az oldott hidrogén (Nm^3/óra)

q_{N_2} - az oldott nitrogén (Nm^3/óra)

q_A - az oldott argon (Nm^3/óra)

q_{CH_4} - az oldott metán (Nm^3/óra)

3.3.3.2. Az S501 és S502 szeparátorokban leváló cseppfolyós ammónia mennyiségének számitása: [6]

$q_{ki}:=F_{NH_3,18}$ vagy $F_{NH_3,19}:=q_{be}*x_{be}-(q_{be}-q_{be}*x_{be})*x_{ki}/(1-x_{ki})$;

$x_{ki}:= 10 \wedge (2,186+5,988/sqrt(p)-1099,5/(273,16+t))$;

Ahol:

x_{ki} - a kilépő gázban az ammónia moltörtje

x_{be} - a belépő gázban az ammónia moltörtje

q_{ki} - a kilépő cseppfolyós ammónia mennyisége (Nm^3/óra)

q_{be} – a belépő gázelegy mennyisége (Nm^3/óra)

3.3.3.3. Az S503 szeparátorból és az E505 hőcserélőből kilépő gázelegy ammónia tartalma: [5]

$$F_{NH_3,16} := \sum_i Q_i * x_{ki,i}/100;$$

$$x_{ki,i} := \left(\underline{\text{if}}\ p > 18{,}24\ \underline{\text{then}}\ 1{,}7+390/p\ \underline{\text{else}}\ 421/p\right)$$

$$* \exp\left((t+tx) * \left(0{,}038-0{,}137_{10}-3 * (t+tx)\right)\right);$$

Ahol:

p – az aktuális nyomás (atm)

t – az aktuális hőmérséklet (°C)

tx – az esetleges hőmérséklet korrekció (°C)

$x_{ki,i}$ – a kilépő gáz ammónia tartalma (%)

Q_i – a kilépő gáz mennyisége (Nm^3/óra)

A számitási eredményeket a 3.3 mellékletben közöljük.*

---

* A hivatkozás az eredeti anyag mellékletére vonatkozik, ami az értekezés mellékletei között nem szerepel.

M.2 Etilénoxidációs kisérleti üzemi reaktor mérlegegyenleteket kielégitő statikus empirikus matematikai modellje

Részlet az

Almásy, G.A., Sztanó, T.: "Empirical Models Satisfying balance Equations";

EFCE kongresszus, Párizs, 1978. C2

előadás anyagából

Nonlinear model

Only a special case is treated. Namely:

a/ The constraints are linear both in inputs and outputs.

b/ The model is linear in its coefficients.

c/ The model equations contain the complete linear model plus additional terms, nonlinear in the input variables.

d/ All model equations have the same structure for all output variables. The difference between them is only due to the difference in the coefficients.

Now it will be shown that the problem with the above restrictions can be reduced to the linear case treated earlier. Denote now the vector of inputs by $\underline{\xi}$ and let vector $\underline{f}$ be composed of the nonlinear functions of $\underline{\xi}$:

$$\underline{f} = \begin{pmatrix} f_1(\underline{\xi}) \\ f_2(\underline{\xi}) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ f_{..}(\underline{\xi}) \end{pmatrix}$$

and let the model be according to the restrictions of the structure

$$\underline{y} = \underline{\underline{B}}_1 \underline{\xi} + \underline{\underline{B}}_2 \underline{f} + \underline{k} \,. \tag{13}$$

If we define the hypermatrix $\underline{\underline{B}}$ and hypervector $\underline{x}$ by

$$\underline{\underline{B}} = (\underline{\underline{B}}_1 \,\vdots\, \underline{\underline{B}}_2) \quad \text{and} \quad \underline{x} = \begin{bmatrix} \underline{\xi} \\ \cdots \\ \underline{f} \end{bmatrix}$$

then it follows that the model equation will be reduced to

$$\underline{y} = \underline{\underline{B}}\,\underline{x} + \underline{k} \,.$$

Evidently the model structure is equivalent with equ. (1).

According to the restriction a/, the constraints are linear both in the input and output variables. Let the coefficient matrix $\underline{\underline{H}}$ be regarded as a hypermatrix composed of two minors $\underline{\underline{H}}_1$ and $\underline{\underline{H}}_2$ being the coefficients of constraints for $\underline{\xi}$ and $\underline{f}$ resp. If the latter is zero, the constraints (3) and (4) take the form

$$\underline{\underline{H}}\,\underline{x} + \underline{\underline{\Gamma}}\,\underline{y} + \underline{\sigma} = \underline{0} \,,$$

with

$$\underline{\underline{H}} = (\underline{\underline{H}}_1 \,\vdots\, \underline{\underline{H}}_2) \,,$$

where $\underline{\underline{H}}_2$ is a zero matrix.

Thus the constraints are reduced formally to the shape of relation (2) and the whole nonlinear problem has been reduced to a linear one.

There is a chance of some of the output variables being unmeasured. Then in order to apply the constrained least squares method, the coefficients in the corresponding columns in $\underline{\underline{\Gamma}}$ are to be eliminated by the appropriate linear combination of the rows of constraints. Obviously every such missing variable reduces the number of constraints by one.

<u>Example</u>

A series of experiments was performed in a small scale ethylene oxide pilot plant. In a tubular reactor the temperature of the cooling medium, the input ethylene and oxygen concentration was changed as independent variable, while the output stream of ethylene, ethylene oxide, carbon dioxid and oxygen was measured as dependent variable. There was no possibility of measuring the water content of the output stream. Let us now construct an approximate model on the basis of these observations.

The independent variables were changed according to a complete 3^3 factorial design.

It has been started by rough previous investigation that the linear approximation does not fit in the range of observations. The following structure seems to be appropriate to describe each output:

$$y_i = k_i + b_{i,1}\xi_1 + b_{i,2}\xi_2 + b_{i,3}\xi_1^2 + b_{i,4}\xi_2^2 + b_{i,5}\xi_1\xi_2 + b_{i,6}\xi_1\xi_3 + b_{i,7}\xi_2\xi_3 + b_{i,8}\xi_1\xi_2\xi_3 + b_{i,9}\xi_1\xi_3^2$$

$$i = 1,2,3,4.$$

with the following meaning of the notation:

ξ_1 : the input ethylene stream in moles
ξ_2 : the input oxygen stream in moles
ξ_3 : the temperature of cooling medium in centigrades
y_1 : the output ethylene stream in moles
y_2 : the output oxygen stream in moles
y_3 : the output ethylene oxide stream in moles
y_4 : the output carbon dioxide stream in moles.

For each output the model structure is chosen identically in order to simplify the solution.

The stochiometric relations yield the basis of balance equations. They are listed in Table 1. Since the output water stream was not measured during the experiments, this stream has to be eliminated by forming the appropriate combination of the oxygen and hydrogen balances as seen in the 4-th row in Table 1. Thus the constraints are given by rows 1 and 4. The coefficient matrices of constraints are given in Table 2. therefrom.

Since the numerical values of measurements and the coefficients obtained do not command general interest, we will abstain from their communication. We note that in the given case the constrained residual variance is about one and a half times as great as the residual variance not satisfying the balance equation. This is obvious even because the constraints do not allow the absolute minimum of the sum of squares to be reached.

Summary

An algorithm is presented, substantially a constrained least squares method, to estimate the coefficients of approximate multiple input - multiple output models so that the resulting model does obey some linear balance equations as constraints. An example is presented, to show the practical application of the algorithm.

Table 1.

Stochiometric balances

row number	input		output				
	C_2H_4	O_2	C_2H_4	O_2	C_2H_4O	CO_2	H_2O
1.Carbon balance	-2	0	2	0	2	1	0
2.Oxygen balance	0	-2	0	2	1	2	1
3.Hydrogen balance	-4	0	4	0	4	0	2
4.2xrow 2 -row 3	4	-4	-4	4	-2	4	0

Table 2.

Coefficient matrices of constraints

$$\underline{\underline{H}}_1 = \begin{bmatrix} -2 & 0 \\ 4 & -4 \end{bmatrix} ; \qquad \underline{\sigma} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{\Gamma}} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 2 & 1 \\ -4 & 4 & -2 & 4 \end{bmatrix}$$

M.3. Földgáz bontó reaktor mérlegegyenleteket kielégitő közelitő dinamikus modellje

Részlet az

Almásy, G.A.: "Dynamic Models Satisfying Balance Equations".

CHEMPLANT'80 konferencia /Héviz, 1980/

elfogadott előadás anyagából

Example

The application of balance constrained parameter estimation is shown by a fictious simulation example as follows. Let us consider a methane-reforming process and apply the notations for the output and input stream components:

output

y_1: methane, CH_4

y_2: hydrogen, H_2

y_3: carbon monoxide, CO

y_4: carbon dioxide, CO_2

y_5: water, H_2O

input

u_1: methane, CH_4

u_2: water, H_2O

u_3: oxygen, O_2

According to them $n(y)= 5$, $n(u)= 3$ and $n(g)= 3$ /the latter corresponding to the three chemical elements in the system/. Let be further the order of the system in $\underline{y}$ and $\underline{\underline{u}}$ $p(y)=2$ and $p(u)= 1$, resp. Coefficient matrices are given in table 1.

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1.82o & o.o & o.o & o.o & o.o \\ o.o & 1.76o & o.o & o.o & o.o \\ o.o & o.o & 1.659 & o.o & o.o \\ o.o & o.o & o.o & 1.65o & o.o \\ o.o & o.o & o.o & o.o & 1.63o \end{pmatrix}$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} -8.27oE-1 & o.o & o.o & o.o & o.o \\ o.o & -7.73oE-1 & o.o & o.o & o.o \\ o.o & o.o & -6.88oE-1 & o.o & o.o \\ o.o & o.o & o.o & -6.75oE-1 & o.o \\ o.o & o.o & o.o & o.o & -6.4ooE-1 \end{pmatrix}$$

$$B_o = \begin{pmatrix} 1.477E-4 & -3.o7oE-5 & -6.2o6E-5 \\ 2.796E-1 & 2.555E-3 & -7.213E-2 \\ 1.458E-1 & -1.694E-2 & -1.4o8E-2 \\ o.o & 1.175E-2 & 1.838E-2 \\ -5.738E-2 & 5.964E-2 & 2.696E-2 \end{pmatrix} \quad B_1 = \begin{pmatrix} -2.o52E-4 & 3.79oE-5 & 1.o52E-4 \\ -3.177E-1 & -4.193E-3 & 9.366E-2 \\ -1.736E-1 & 2.o41E-2 & 2.231E-2 \\ o.o & -1.488E-2 & -2.588E-2 \\ 6.75oE-2 & -6.856E-2 & -4.424E-2 \end{pmatrix}$$

Table 1.

True model coefficient matrices

Outputs are burdened with unknown independent Gaussian white noise processes with standard deviations 2.o, lo.o, 5.o, 5.o and lo.o resp. Inputs for the purpose of identification were generated as independent Gaussian white noise processes with standard deviations 5oo.o, looo.o and 2oo.o resp. /All quantities are ment in standard normal m^3/h. Working point values were 1664o.o, 6671.o and 3937.o in the same unit./ Matrices $\underline{\underline{V}}$ and $\underline{\underline{W}}$

were taken as unit matrices. The number of simulation runs was 4o.

The constraining equations to be fulfilled are the carbon, hydrogen and oxygen balances. Thus the elements of matrix $\underline{G}$ are the stoichiometric figures of the output and input components, negative for output and positive for input. Matrix $\underline{G}$ is presented in table 2.

$$G = \begin{pmatrix} -1.00 & 0.00 & -1.00 & -1.00 & 0.00 & 1.00 & 0.00 & 0.00 \\ -4.00 & -2.00 & 0.00 & 0.00 & -2.00 & 4.00 & 2.00 & 0.00 \\ 0.00 & 0.00 & -1.00 & -2.00 & -1.00 & 0.00 & 1.00 & 2.00 \end{pmatrix}$$

Table 2.

Balance coefficient matrix $\underline{\underline{G}}$

Results of our simulation study are shown in tables 3 to 5. Table 3 presents the model coefficients obtained by unconstrained estimation, table 4 the same, estimated with balance constraints. Compared them to the true values in table 1, there is no much difference to be seen between the quality of the estimates. Both are more or less poor, evidently due to the low number of observations and the incorrect choice of weighting matrices where off-diagonal elements of self-correlations and covariances were neglected. Estimated outputs, however, show somewhat better agreement with the true values, as it can be seen from the objective function values. The sum of squares of estimation error is 6227 and 6667 for the unconstrained and balance-constrained estimation, resp. The quadratic mean thereof is 12.5 and 12.9. These figures are not

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1.590 & 2.717E-3 & -9.427E-3 & -1.789E-2 & 6.156E-3 \\ 1.317E-1 & 1.304 & -9.944E-3 & 4.763E-2 & -1.069E-2 \\ 4.338E-1 & 1.443E-2 & 1.547 & -1.379E-2 & -6.136E-2 \\ 5.559E-2 & -1.819E-2 & -7.664E-2 & 1.570 & -8.509E-2 \\ -4.396E-1 & 2.186E-2 & -1.451E-1 & 2.162E-1 & 1.517 \end{pmatrix}$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} -7.647E-1 & -1.184E-2 & 2.941E-2 & 6.164E-3 & 6.479E-3 \\ -6.222E-1 & -8.297E-1 & 8.629E-2 & -1.305E-1 & 5.299E-2 \\ -1.789E-1 & -6.939E-4 & -6.532E-1 & 6.911E-2 & 1.499E-2 \\ -1.808E-1 & 2.506E-2 & 5.407E-3 & -6.487E-1 & 3.023E-2 \\ 3.377E-1 & -2.608E-2 & 1.554E-1 & -1.599E-1 & -5.142E-1 \end{pmatrix}$$

$$B_0 = \begin{pmatrix} 9.843E-4 & -4.042E-4 & 2.410E-3 \\ 2.743E-1 & 2.635E-3 & -4.703E-2 \\ 1.452E-1 & -1.623E-2 & -1.452E-2 \\ 1.835E-3 & 1.235E-2 & 2.031E-2 \\ -5.336E-2 & 6.218E-2 & 1.983E-2 \end{pmatrix} \quad B_1 = \begin{pmatrix} 7.533E-4 & -2.952E-4 & 1.097E-3 \\ -3.308E-1 & -9.070E-3 & 1.024E-1 \\ -1.637E-1 & 2.460E-2 & 2.177E-2 \\ 1.309E-2 & -8,739E-3 & -2.659E-2 \\ 8.500E-2 & -6.627E-2 & -6.661E-2 \end{pmatrix}$$

Table 3.

Model coefficient matrices obtained by unconstrained estimation

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1.781 & -9.689E-3 & 3.921E-2 & 2.186E-2 & 1.536E-2 \\ 4.053E-1 & 1.786 & 4.331E-2 & 7.537E-2 & -3.498E-3 \\ 7.880E-1 & -2.445E-2 & 1.617 & -4.527E-2 & -6.224E-2 \\ -4.530E-1 & 4.649E-2 & -1.650E-1 & 1.676 & -7.384E-2 \\ -1.748E-1 & 9.357E-3 & -7.084E-2 & 3.064E-1 & 1.534 \end{pmatrix}$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} -8.274E-1 & 6.004E-3 & -2.083E-2 & -2.873E-2 & -6.539E-3 \\ -7.485E-1 & -8.067E-1 & 3.068E-2 & -1.617E-1 & 3.956E-2 \\ -5.492E-1 & 4.358E-2 & -7.308E-1 & 6.544E-2 & -2.026E-3 \\ 4.902E-1 & -4.482E-2 & 1.081E-1 & -6.797E-1 & 5.105E-2 \\ 3.193E-1 & -4.803E-3 & 8.138E-2 & -2.312E-1 & -5.335E-1 \end{pmatrix}$$

$$B_0 = \begin{pmatrix} 6.061E-4 & -3.594E-4 & 2.399E-3 \\ 2.740E-1 & 2.712E-3 & -4.722E-2 \\ 1.453E-1 & -1.603E-2 & -1.518E-2 \\ 1.307E-3 & 1.199E-2 & 2.157E-2 \\ -5.413E-2 & 6.220E-2 & 1.989E-2 \end{pmatrix} \quad B_1 = \begin{pmatrix} -2.726E-3 & -4.750E-4 & 8.140E-4 \\ -3.335E-1 & -8.863E-3 & 1.021E-1 \\ -1.628E-1 & 2.646E-2 & 2.232E-2 \\ 7.804E-3 & -1.264E-2 & -2.806E-2 \\ 7.790E-2 & -6.720E-2 & -6.752E-2 \end{pmatrix}$$

Table 4.

Model coefficient matrices obtained by balance-constrained estimation

.1

too high compared to the absolute values of the variables, being some hundreds in their order of magnitude. Observe that there is fairly small difference between the two objective function values.

On the other hand, the fulfilment of balance equations according to eq. /8/ is very bad in the unconstrained case. This fact can be seen comparing the values of table 5 with the true coefficients presented in table 2. The values in table 5 show the best possible approximation of matrix $\underline{\underline{G}}$ from the model coefficients obtained by unconstrained estimation. The highest difference is shown by the 2-nd row, 5-th column element with a value of 2.11. In contrary, the values from constrained estimation show full agreement with the true values within the range of numerical accuracy. The highest difference is no more than 1.3E-6.

$$G = \begin{pmatrix} -1.01 & 0.06 & -0.82 & -0.93 & -0.29 & 1.03 & 0.27 & 0.11 \\ -4.06 & -0.07 & -1.07 & -0.30 & 0.11 & 3.71 & 0.68 & -0.62 \\ 0.01 & 0.04 & -1.41 & -2.15 & -0.29 & -0.09 & 0.45 & 1.73 \end{pmatrix}$$

Table 5.

Balance coefficient matrix $\underline{\underline{G}}$ obtained from unconstrained estimation

In order to point out the false results of unconstrained estimation we present the best composition formulae of output and input components, fitting the model coefficients:

		output	input
methane	:	$C_{1.01}H_{4.06}O_{0.01}$	$C_{1.03}H_{3.71}O_{-0.09}$
hydrogen	:	$C_{-0.06}H_{0.07}O_{0.04}$	-
carbon monoxide	:	$C_{0.82}H_{1.07}O_{1.41}$	-
carbon dioxide	:	$C_{0.93}H_{0.30}O_{2.15}$	-
water	:	$C_{0.29}H_{-0.11}O_{0.29}$	$C_{0.27}H_{0.68}O_{0.45}$
oxygen	:	-	$C_{0.11}H_{-0.62}O_{1.73}$

It can be stated that some of them were acceptable /as output methane, e.g./ but others are totally false.

M.4 A rendkivüli hiba helyének kimutatása

M.4.1 Részlet a

Ripps, D.L.: "Adjustment of Experimental Data"

Chem. Engineering Progress Symposium Series 61, p.8 /1965/ cikkből.

M.4.2 Az előző cikk mintapéldájának megoldása az értekezés 6.fejezetében ismertetett algoritmussal.

ADJUSTMENT OF EXPERIMENTAL DATA

David L. Ripps

Adjustment of process data is often necessary to close material and energy balances. Lack of closure arises both from gross errors in the data (for example, major blunders or strong instrument biases) and from small random errors. In data adjustment the distinction between these two types of errors must be maintained.

A method of data adjustment has been developed which permits this distinction. The analyst first classifies his data into either the group having gross errors or else the group having small errors. Each measurement is then adjusted to close material and energy balances. The adjustments are chosen to satisfy a suitable least-squares criterion.

The analyst may wish to try many different classifications. The problem need not be solved in full each time; an algorithm is provided to convert the solution for one classification very readily into the solution for another.

In many applications data from a steady state chemical process must show an exact closure of material and energy balances. One example is the estimation of heat and mass transfer coefficients for operating process equipment. The equations for estimating transfer coefficients are based on conservation of mass and energy. Thus the data used with these equations must also obey these laws.

A consistent set of data is one for which material and energy balances close exactly. Process data, just as taken, are usually not consistent. In this paper a numerical method is developed to adjust experimental measurements to make them internally consistent.

The problem of data adjustment has been considered before (2). The novel feature of the current method is that it permits a distinction between two major types of errors in process data: gross blunders and small random errors. This distinction has been found very necessary to obtain a useful data adjustment.

A procedure for adjusting data containing only small errors is outlined in the next section. The formulation is essentially that of Kuehn and Davidson (2), modified in anticipation of our later needs. The author then expands the procedure to allow for both gross and small errors. Finally, the last section is devoted to the efficient numerical solution of the expanded data adjustment problem.

ADJUSTMENT OF DATA CONTAINING ONLY SMALL RANDOM ERRORS

Consider a set of measurements from a typical steady state chemical process. This data is for a single run, that is, a single fixed operating condition. There are I measurements. The individual values are denoted by $m_i (i = 1, 2, 3, \ldots, I)$; M is the vector whose i-th component is m_i.

Each of the measurements is an estimate of some underlying physical quantity (such as a mass flow rate or an enthalpy flow rate). Usually the measurement and the physical quantity are not the same. The difference is called the *measurement error.*

Envision measurement errors of two distinct sizes. The first are very small errors arising, for example, from normal process fluctuation, minor sampling or meter bias, and random variation in the operation of an instrument. In most chemical processes, fluctuation and bias error are only a minor fraction of the total measurement, and thus the measurement is approximately equal to its underlying physical quantity.

In direct contrast to these small errors are the very large errors introduced by overt blunder, complete malfunctioning of an instrument, or very strong instrument bias. These errors are characteristically so large that the measurement bears little relation to the underlying physical quantity.

In the typical process being considered small errors are the usual, and gross errors are the unusual. A gross error may occur occasionally in any of the instruments. However, in any given set of data the number of such large errors is generally small compared with I, the total number of measurements taken.

Because of the two types of errors just mentioned, a set of measured data is usually not internally consistent. Thus, an adjustment is made to each of the measured values m_i so that the altered data x_i satisfies material balances, energy balances, and similar consistency restrictions. Let there be J such restrictions. Each may be put into the form

$$\psi_j(X) = 0, \quad j = 1, 2, 3, \ldots, J \qquad (1)$$

American Cyanamid Company, Wayne, New Jersey.
David L. Ripps is at New York University, New York, New York.

where X represents the vector of adjusted data (that is, a vector whose i-th component is x_i). The number of restrictions J must be less than I; otherwise X could be computed from Equation (1) independently of the measurements.

In the current analysis ψ_j is limited to linear relations:

$$\psi_j(X) = \sum_{i=1}^{I} a_{ji} x_i = 0 \qquad (2)$$

Material balances are readily formulated in this way by using the mass flow rate (pounds per hour or moles per hour) as X. Similarly when X is enthalpy flow rate (British thermal units per hour), ψ_j becomes linear.

With this formulation the X's are generally not primary measurements such as the ΔP across an orifice or a thermometer reading; they are heat or mass flows computed from primary measurements. The adjustments to these heat and mass flows are made first. Then, as a separate problem, the corrections to the flows are analyzed to try to reflect the adjustments back to the primary measurements.

When the data contains only small errors (that is, no gross errors), it is usually best to make the data consistent by applying the smallest possible set of corrections. To be precise, one should choose, out of all the possible sets of corrections which make the data consistent, that set for which the sum of squares of the individual adjustments is a minimum. In forming this sum of squares the individual adjustments $(x_i - m_i)^2$ are weighted inversely with some estimate of the variance (s_i^2) of the measurement being adjusted. Mathematically, this is written as

$$X: \begin{cases} \phi(X) = \sum_{i=1}^{I} \left(\dfrac{x_i - m_i}{s_i} \right)^2 = \text{MIN} \\ \psi_j(X) = 0; \quad j = 1, 2, 3, \ldots, J < I \end{cases} \qquad (3)$$

To solve Equation (3) the restrictions are introduced into the object function with Lagrange multipliers; then the normal equations are formed:

$$\left.\begin{aligned} &\frac{\partial\left[\phi + \sum_{j=1}^{J} \lambda_j \psi_j\right]}{\partial x_i} = \frac{2}{s_i^2}(x_i - m_i) + \sum_{j=1}^{J} a_{ji}\lambda_j = 0 \\ &\qquad i = 1, 2, 3, \ldots, I \\ &\frac{\partial\left[\phi + \sum_{j=1}^{J} \lambda_j \psi_j\right]}{\partial \lambda_j} = \sum_{i=1}^{I} a_{ji} x_i = 0 \\ &\qquad j = 1, 2, 3, \ldots, J \end{aligned}\right\} \qquad (4)$$

Rearranging one obtains

$$\left.\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{I} a_{ji} x_i = 0, \quad j = 1, 2, 3, \ldots, J \\ &\sum_{j=1}^{J} a_{ji}\lambda_j + \frac{2}{s_i^2} x_i = \frac{2m_i}{s_i^2}, \quad i = 1, 2, 3, \ldots, I \end{aligned}\right\} \qquad (5)$$

It is convenient to write Equation (5) in matrix form:

$$\left[\begin{array}{c|c} 0 & A \\ \hline A^T & S \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \Lambda \\ \hline X \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} 0 \\ \hline b \end{array}\right] \qquad (6)$$

The solution of Equation (6) is

$$\left[\begin{array}{c} \Lambda \\ \hline X \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c} 0 & A \\ \hline A^T & S \end{array}\right]^{-1} \left[\begin{array}{c} 0 \\ \hline b \end{array}\right] \qquad (7)$$

ADJUSTMENT OF DATA CONTAINING BOTH GROSS AND SMALL ERRORS

The procedure outlined in the previous section has been found to work well for data containing only small errors. However, when the set of data contains major errors, this least-squares procedure, as it stands, is inadequate. Because the individual adjustments appear as the square, a high penalty is imposed on making any single large correction. Thus, a gross error present in one measurement is attributed to a series of small errors in each measurement. This distribution of the gross error has two disadvantages: it makes the data as a whole highly inaccurate, and it does not indicate which measurement had the gross error to guide instrument repair or similar corrective action.

As an illustration consider the following simple case. Four mass flows are measured, two entering and two leaving a chemical reactor (Table 1).

TABLE 1. DATA FOR ILLUSTRATIVE EXAMPLE

Index i	Measurement, m_i	(Variance)$^{1/2}$, s_i
	1,000 lb. moles/hr.	
1	0.1858	0.017
2	4.7935	0.050
3	1.2295	0.024
4	3.8800	0.200

To actually obtain a solution, one makes use of the formula for the inverse of a partitioned matrix:

$$\left[\begin{array}{c|c} 0 & A \\ \hline A^T & S \end{array}\right]^{-1} = \left[\begin{array}{c|c} B_1 & B_2 \\ \hline B_3 & B_4 \end{array}\right] \qquad (8)$$

$$B_0 = -AS^{-1}A^T \text{ (nonsingular)}$$
$$B_1 = B_0^{-1}$$
$$B_2 = -B_0^{-1}AS^{-1} = B_3^T$$
$$B_4 = S^{-1}[I - A^T B_2]$$

The relations in Equation (8) reduce the order of the largest matrix that need be inverted from $I + J$ to J.

There are three elemental material balances:

$$\psi_1 = 0.1x_1 + 0.6x_2 - 0.2x_3 - 0.7x_4$$
$$\psi_2 = 0.8x_1 + 0.1x_2 - 0.2x_3 - 0.1x_4$$
$$\psi_3 = 0.1x_1 + 0.3x_2 - 0.6x_3 - 0.2x_4$$

The matrical expression of the data adjustment, Equation (6), is

$$\left[\begin{array}{ccc|cccc} 0 & 0 & 0 & 0.1 & 0.6 & -0.2 & -0.7 \\ 0 & 0 & 0 & 0.8 & 0.1 & -0.2 & -0.1 \\ 0 & 0 & 0 & 0.1 & 0.3 & -0.6 & -0.2 \\ \hline 0.1 & 0.8 & 0.1 & 6920.415 & 0 & 0 & 0 \\ 0.6 & 0.1 & 0.3 & 0 & 800. & 0 & 0 \\ -0.2 & -0.2 & -0.6 & 0 & 0 & 3472.22 & 0 \\ -0.7 & -0.1 & -0.2 & 0 & 0 & 0 & 50. \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \hline x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \hline 1285.813 \\ 3834.800 \\ 4269.094 \\ 194.000 \end{array}\right]$$

The solution, Equations (7) and (8), is

$$\left[\begin{array}{c} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \hline x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} 90.7652 \\ 199.3583 \\ -423.8460 \\ \hline 0.167567 \\ 4.859449 \\ 1.172970 \\ 3.854045 \end{array}\right]$$

The results of the adjustment are summarized in Table 2 in terms of the relative error, that is, $(x_i - m_i)/s_i$.

TABLE 2. RESULTS OF BASIC DATA ADJUSTMENT

Index i	True relative error (used to create the data)	abs. error	Relative error found by data adjustment
1	−0.7 (small)	−0.0177	−1.073
2	+5.0 (gross)	0.2500	+1.317
3	−0.5 (small)	−0.0120	−2.352
4	+0.6 (small)	0.1200	−0.130

As expected the gross error in measurement 2 is distributed among all measurements. Notice also that the largest relative adjustment is made to measurement 3, even though measurement 3, in fact, contains the smallest relative error.

Both difficulties vanish if the basic least-squares procedure is modified to allow a certain number of the measurements to be discarded as gross errors (I). If only a few measurements are discarded, one can usually use the redundancy present in the material and energy balances to then estimate this lost data.

This idea may be expressed mathematically by introducing I auxiliary variables δ_i into the basic data adjustment equation, Equation (3):

$$X: \begin{cases} \phi(X, \Delta) = \sum_{i=1}^{I} \delta_i \dfrac{(x_i - m_i)^2}{s_i^2} = \text{MIN} \\ \delta_i = 0 \text{ or } 1 \\ \psi_j(X) = 0 \quad j = 1, 2, 3, \ldots, J < I \end{cases} \tag{9}$$

Each δ_i is assigned one of two possible values:

$$\delta_i = \begin{cases} 0, \text{ if measurement } i \text{ is considered to have a gross error} \\ 1, \text{ if measurement } i \text{ is considered to have a small error} \end{cases} \tag{10}$$

Δ denotes the vector whose i-th element is δ_i. The effect of Δ is thus to conveniently drop the suspected gross errors from the least-squares criterion.

To use this data adjustment policy, the analyst first classifies his data into either the group containing gross errors or else the group containing small errors. The δ corresponding to each measurement considered grossly in error is assigned the value 0; the δ corresponding to each measurement considered slightly in error is assigned the value 1. After this assignment of Δ, the data adjustments $(x_i - m_i)$ are computed to minimize the new least-squares criterion $\phi(X,\Delta)$. Usually, the analyst will wish to investigate many possible assignments of the gross errors; an efficient algorithm for this is contained in the last section.

Before the mechanism for computing the adjustments is presented, look at the final results for the simple example introduced before (Table 3). One measurement was discarded as a gross error, each possibility having been tried in turn.

Discarding measurement 2 one gets the minimum value of ϕ and the adjustment closest to the true relative errors.

TABLE 3. RESULTS OF EXPANDED DATA ADJUSTMENT

Measurement	True relative error	Relative correction when discarding measurement 1	2	3	4
1	−0.7	−1.078	−0.634	−0.181	−1.072
2	+5.0	+1.225	+5.665	+0.190	+1.285
3	−0.5	−2.388	−0.167	−2.905	−2.358
4	+0.6	−0.155	+0.733	−0.362	−0.143
	$\phi(X, \Delta) =$	7.227	0.967	1.562	8.361

Often the minimum in ϕ coincides with the most correct data adjustment. But this need not be the case. The correctness of any possible classification and resultant data adjustment is best determined by subsequent tests, for example reasonability of transfer coefficients and other parameters computed from the data, consistency of the parameters from run to run, and recalibration of suspect instruments.

ready been carried out, and the inverse is at hand:

$$\left[\begin{array}{c|c} 0 & A \\ \hline A^T & S \end{array}\right]^{-1}_{\Delta\equiv 1} = \left[\begin{array}{c|c} B_1 & B_2 \\ \hline B_3 & B_4 \end{array}\right]_{\Delta\equiv 1} \tag{11}$$

The illustrative problem of the third section will be carried through all of the numerical processes of this section. Measurement 2 is being discarded (that is, $\Delta = 1, 0, 1, 1$). Equation (11) for this illustration is

$$\left[\begin{array}{ccc|cccc} 0 & 0 & 0 & 0.1 & 0.6 & -0.2 & -0.7 \\ 0 & 0 & 0 & 0.8 & 0.1 & -0.2 & -0.1 \\ 0 & 0 & 0 & 0.1 & 0.3 & -0.6 & -0.2 \\ \hline 0.1 & 0.8 & 0.1 & 6920.415 & 0 & 0 & 0 \\ 0.6 & 0.1 & 0.3 & 0 & 800. & 0 & 0 \\ -0.2 & -0.2 & -0.6 & 0 & 0 & 3472.22 & 0 \\ -0.7 & -0.1 & -0.2 & 0 & 0 & 0 & 50. \end{array}\right]^{-1}_{\Delta\equiv 1} =$$

$$\left[\begin{array}{ccc|cccc} -967.30 & 483.93 & 2679.6 & -0.080686 & -0.33988 & 0.43520 & -1.8558 \\ 483.93 & -1178.1 & 4143.2 & 1.2950 & -0.44403 & 0.065235 & -0.21423 \\ 2679.6 & 4143.2 & -11012. & -0.35856 & 1.6019 & -1.5099 & 1.7532 \\ \hline -0.080686 & 1.2950 & -0.35856 & 1.1412\times10^{-6} & 3.3093\times10^{-5} & 7.9880\times10^{-6} & 2.6246\times10^{-5} \\ -0.33988 & -0.44403 & 1.6019 & 3.3093\times10^{-5} & 9.5971\times10^{-4} & 2.3165\times10^{-4} & 7.6115\times10^{-4} \\ 0.43520 & 0.065235 & -1.5099 & 7.9881\times10^{-6} & 2.3165\times10^{-4} & 5.5916\times10^{-5} & 1.8373\times10^{-4} \\ -1.8558 & -0.21423 & 1.7532 & 2.6246\times10^{-5} & 7.6115\times10^{-4} & 1.8373\times10^{-4} & 6.0367\times10^{-4} \end{array}\right]_{\Delta\equiv 1}$$

ALGORITHM FOR EXPANDED DATA ADJUSTMENT

This section contains a procedure for computing the adjustment for any classification Δ from the results of a basic data adjustment $\Delta \equiv 1$.

To begin with, notice that Equation (7) can be the solution to both the basic data adjustment problem Equation (3) and the expanded data adjustment problem Equation (9). All that is needed is a new definition of S and b:

S becomes an $I \times I$ diagonal matrix whose i-th element is $\dfrac{2\delta_i}{s_i^2}$.

b becomes a column vector of dimension I whose i-th element is $\dfrac{2m_i\delta_i}{s_i^2}$.

Also see that the difficult part in using Equation (7) is obtaining the inverse matrix. Thus this discussion is limited to the process of inversion. The method to be used was adapted from Section 3 of a paper by Rosen (3).

The basis of all expanded data adjustments is a solution to the basic adjustment $\Delta \equiv 1$. Assume the computations indicated by Equation (8) have al-

The number of measurements assumed to have gross errors is denoted by N ($N = 1$ for illustration). For reasons which will be apparent later, renumber the indexes to make the measurements to be discarded x_{I-N+1} through x_I and the measurements to be retained x_1 through x_{I-N}. This process is accomplished by interchanging some of the rows and also some of the columns on both sides of Equation (11). The result is

$$\left[\begin{array}{c|c} 0 & \tilde{A} \\ \hline \tilde{A}^T & \tilde{S} \end{array}\right]^{-1}_{\Delta\equiv 1} = \left[\begin{array}{c|c} \tilde{B}_1 & \tilde{B}_2 \\ \hline \tilde{B}_3 & \tilde{B}_4 \end{array}\right]_{\Delta\equiv 1} \tag{12}$$

For the illustration, measurement 2 is renumbered 4 and vice versa:

$$\left[\begin{array}{ccc|cccc} 0 & 0 & 0 & 0.1 & -0.7 & -0.2 & 0.6 \\ 0 & 0 & 0 & 0.8 & -0.1 & -0.2 & 0.1 \\ 0 & 0 & 0 & 0.1 & -0.2 & -0.6 & 0.3 \\ \hline 0.1 & 0.8 & 0.1 & 6920.415 & 0 & 0 & 0 \\ -0.7 & -0.1 & -0.2 & 0 & 50. & 0 & 0 \\ -0.2 & -0.2 & -0.6 & 0 & 0 & 3472.22 & 0 \\ 0.6 & 0.1 & 0.3 & 0 & 0 & 0 & 800. \end{array}\right]^{-1}_{\Delta\equiv 1} =$$

M.4.2.

A Ripps féle feladat megoldása a 6.fejezet algoritmusával:

Az eredeti cikk szerint

$$A = \begin{pmatrix} 0.1 & 0.6 & -0.2 & -0.7 \\ 0.8 & 0.1 & -0.2 & -0.1 \\ 0.1 & 0.3 & -0.6 & -0.2 \end{pmatrix} ,$$

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} 0.1858 \\ 4.7935 \\ 1.2295 \\ 3.8800 \end{pmatrix}$$

$$V_{\tilde{d}} = \begin{pmatrix} 0.000289 & & & \\ & 0.002500 & & \\ & & 0.000576 & \\ & & & 0.040000 \end{pmatrix}$$

Ezekből a 6.fejezet jelöléseivel

$$M = (AV_{\tilde{d}}A')^{-1/2}A$$

$$M = \begin{pmatrix} -4.9772 & 1.8728 & 8.8700 & -4.8440 \\ 58.0100 & -0.3520 & -4.9568 & -0.5698 \\ -6.5473 & 9.4478 & -35.9968 & -0.6722 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{\varphi} = (AV_{\tilde{d}}A')^{-1/2}\tilde{f}$$

$$\tilde{\varphi} = \begin{pmatrix} 0.1621 \\ 0.7870 \\ -2.7974 \end{pmatrix}$$

és

$$c_j = m_j(m_j'm_j)^{-1/2} \qquad C = \begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ c_3' \\ c_4' \end{pmatrix}$$

vel

$$C = \begin{pmatrix} -0.0849 & 0.9901 & -0.1117 \\ 0.1943 & -0.0365 & 0.9802 \\ 0.2371 & -0.1325 & -0.9624 \\ -0.9838 & -0.1157 & -0.1365 \end{pmatrix}$$

Ezekből a (6.9) összefüggés szerint

$$\gamma = \begin{pmatrix} 0.370349 \\ -0.941117 \\ 0.902341 \\ 0.045107 \end{pmatrix}$$

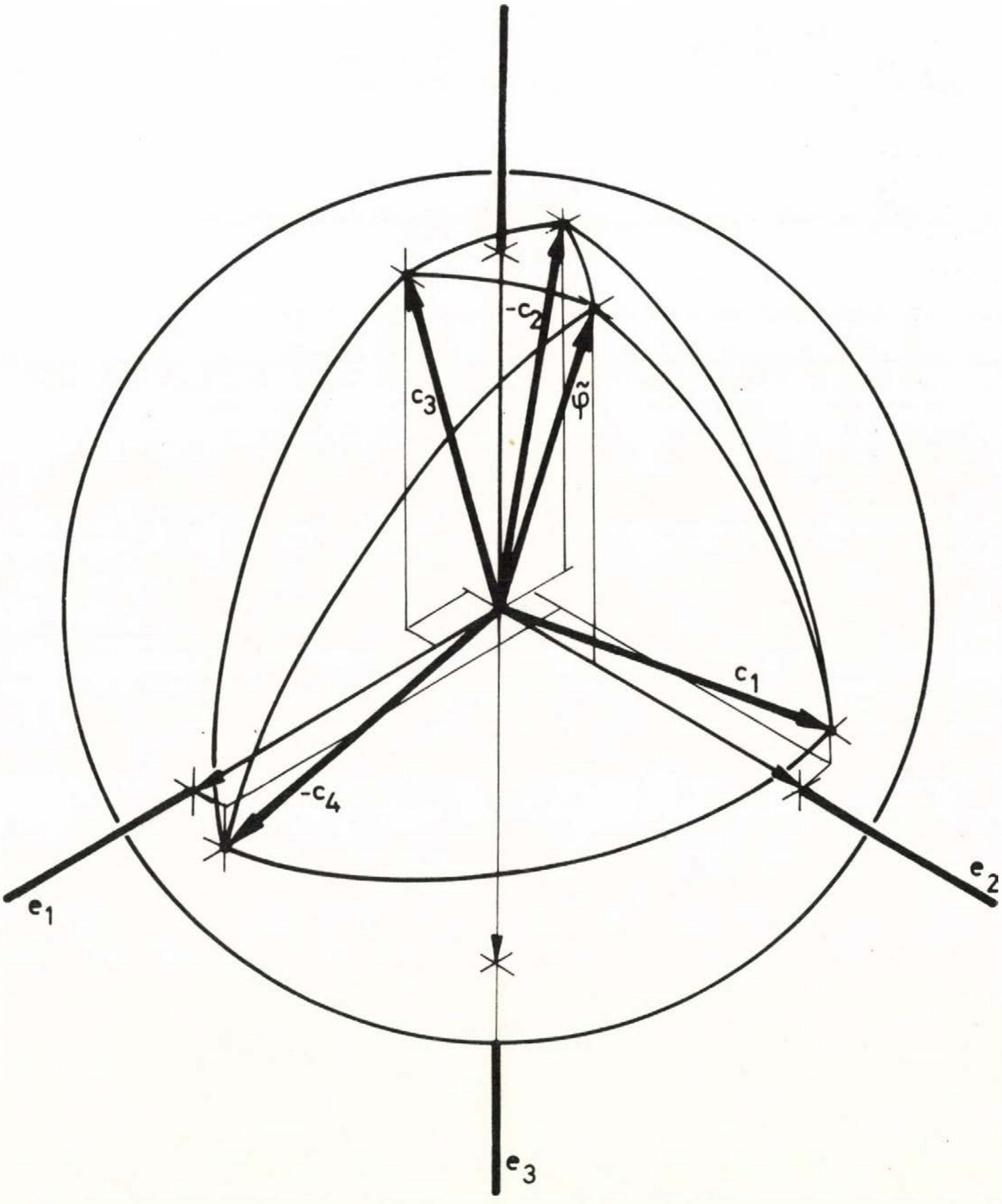
γ legnagyobb abszolut értékü eleme a második, igy az algoritmus ezt minősiti rendkivüli hibával terheltnek, Ripps cikkének 2.táblázatával egybehangzóan.

A normált mérleghiba vektornak a normált **M** együtthatómátrix m_j oszlopaival bezárt szögei eszerint a következők:

$$\measuredangle(m_j, \tilde{\varphi}) = \text{arc cos}\,|\gamma_j| = \begin{pmatrix} 68.26^\circ \\ 19.76^\circ \\ 25.53^\circ \\ 87.41^\circ \end{pmatrix}$$

Feltünő, hogy $\tilde{\varphi}$-nak az m_2 és m_3 oszlopvektorokkal bezárt szöge csak kis mértékben különbözik. Ez abból következik, hogy m_2 és m_3 egymással aránylag kis szöget zár be (35°-ot), tehát a két mérőhely rendkivüli hibája a 6.fejezetben ismertetett módszerrel meglehetősen nehezen különböztethető meg.

A C mátrix sorvektorait és a normált $\tilde{\varphi}$ vektort a hibavektorok 3 dimenziós terében az <u>M.4.1 ábrán</u> mutatjuk be. $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$ és $\mathbf{e}_3$ a megfelelő koordináta egységvektorokat jelöli.



M.4.1 ábra

A hibahely kimutatás elvének szemléltetése

M.5 A rendkivüli hiba helyét kimutató algoritmus hatékonyságának vizsgálata

Részlet az

Almásy, G.A., Sztanó T.: "Checking and Correction of Measurements on the Basis of Linear System Model";

Problems of Control and Information Theory, 4, p.57 /1975/

cikkből

Problems of Control and Information Theory, Vol. 4 (1), pp. 57—69 (1975)

CHECKING AND CORRECTION OF MEASUREMENTS ON THE BASIS OF LINEAR SYSTEM MODEL

G. A. ALMÁSY, T. SZTANÓ

(Budapest)

(Received June 5, 1974)

Appendix 2

The efficiency of the error detecting algorithm according to the relations (29)—(32) but with $\mathbf{g}_k$ values instead of $\mathscr{E}(\mathbf{g})$ is illustrated by computer simulation. Two systems were studied, both with various dispersion of regular errors. (For the sake of simplicity, errors were generated independently, i.e. $\mathbf{V}_{\bar{d}}$ was taken as diagonal matrix.) Extreme error was generated alternately at all measurement points with an absolute value of 2, 4, 8, 16 and 32fold of the correspondent dispersion of regular error. Table 1 shows the relative number of hits, for several dispersion of regular and several values of extreme errors.

The table is indicating the obvious dependence of the effectivity on the magnitude of extreme error. For the two cases in question we can conclude that extreme errors of double magnitude cannot be detected by this way, but those of 8fold magnitude are detected fairly well.

Table 1

The relative number of hits in error detection

System 1

dispersion of measurement errors \ relative magnitude of extreme error:										2	4	8	16	32
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	.24	.58	.98	1.00	1.00
10	1	1	1	1	1	1	1	1	1	.22	.55	.91	.99	1.00
63	1	1	1	1	1	1	1	1	1	.23	.57	.98	1.00	1.00

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

System 2

dispersion of measurement errors \ relative magnitude of extreme error:						2	4	8	16	32
1	1	1	1	1	1	.43	.77	1.00	1.00	1.00
1	1	1	1	1	0.01	.35	.73	.85	.92	.95
1	1	1	1	1	100	.38	.60	.72	.85	.90
1	2	4	8	16	32	.32	.58	.85	.98	1.00

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

A TANULMÁNYOK sorozatban 1979-ben megjelentek:

99/1979 Ivics József: KGST Riga

100/1979 Téli iskola

1980-ban jelentek meg:

101/1980 Gerencsér László - Hangos Katalin: Diszkrét lineáris sztochasztikus rendszerek önhangoló szabályozása.

102/1980 Pásztorné Varga Katalin: Rekurziv eljárás

103/1980 Gerencsér Piroska - Szép Endre - Zilahy Ferenc Marton Zsolt: Robotmegfogók adaptivitása I.

104/1980 Knuth Elöd - Radó Péter - Tóth Árpád: Az SDLA előzetes ismertetése

105/1980 E. Knuth - P. Radó - Á. Tóth: Preliminary description of SDLA

106/1980 Prékopa András: Sztochasztikus programozási modellek és alkalmazásuk

107/1980 Kelle Péter: Megbizhatósági készletmodellek és alkalmazásai