ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
FAKULTA ELEKTROTECHNICKÁ
KATEDRA ŘÍDICÍ TECHNIKY

DIPLOMOVÁ PRÁCE

ALGORITMY PRO NELINEÁRNÍ SLADĚNÍ DAT

TOMÁŠ VÍTEK **2004**

ABSTRAKT

Měřená data, která slouží řídicím procesům v průmyslu, bývají často zatížena chybami. Pro zpřesnění těchto dat je možné využít metodu sladění dat, která zpřesní data tak, aby vyhovovala fyzikálním nebo chemickým bilancím, kterým řízený proces odpovídá. Takto sladěná data pak vyhovují fyzikálnímu modelu zařízení, jehož funkce je řízena.

V této práci formulujeme úlohu sladění dat pro případ tepelného zařízení - parního generátoru. V případě tepelných systémů se ve výsledku jedná o řešení problému minimalizace kvadratické formy za omezení bilineárního charakteru. Z přístupů k řešení jsme zvolili metodu projekce gradientu a metodu sekvenčního kvadratického programování (SQP), které jsou spolu porovnávány z hlediska efektivity a robustnosti řešení na datech získaných měřením parního generátoru.

ABSTRACT

In order to improve the accuracy of process data, the data reconsiliation method can be used. Data reconsiliation takes advantage of physical and chemical balances which can be arranged to decrease the measurement errors. Data processed by data reconsiliation are in harmony with the physical model of technology which is further used for optimization of the process.

This thesis claims to formulate the data reconsiliation task in case of the heat system - the steam generator. The final form of problem is to minimize quadratic function subject to bilinear constrains. From various possible solutions we chose the gradient projection method and the sequential quadratic programming method (SQP). These too methods are compared in terms of efficiency and robustness in solving the reconsiliation of steam generator's data.

OBSAH

1. Úvod 4
2. Formulace problému sladění dat 4
   2.1 Bilanční rovnice 4
   2.2 Modelování tepelných systémů 5
      2.2.1 Směšovač 6
      2.2.2 Tepelný výměník 7
   2.3 Sladění dat 8
      2.3.1 Formulace problému sladění dat 9
      2.3.2 Členění proměnných 9
3. Matematická formulace problému 11
   3.1 Odvození minimalizace funkce při nelineárních omezeních 11
   3.2 Odvození minimalizace funkce při lineárních omezeních 13
   3.3 Odvození minimalizace funkce při bilineárních omezeních 15
   3.4 Metoda projekce gradientu 17
   3.5 Numerická metoda pokutových funkcí 11
   3.6 Duální metody hledání vázaného extrému 23
4. Aplikace metody sladění dat na parní generátor 24
   4.1 Účel výpočtu 24
   4.2 Blokové schéma parního kotle 25
   4.3 Tepelné ztráty kotle a účinnost 28
      4.3.1 Ztráta mechanickým nedopalem 28
      4.3.2 Ztráta chemickým nedopalem 29
      4.3.3 Ztráta sáláním a vedením tepla do okolí 29
      4.3.4 Ztráta fyzickým teplem tuhých zbytků 29
      4.3.5 Ztráta citelným teplem spalin (komínová) 30
      4.3.6 Účinnost kotle 30
      4.3.7 Výrobní teplo páry 31
   4.4 Sestavení bilančních rovnic 31
   4.5 Analýza výsledného problému 32
5. Určení entalpií tepelných toků - sestavení bilančních rovnic konkrétního zadání 32
   5.1 Cesta spalovacího vzduchu 33
   5.2 Určení základní energetické hladiny 34
   5.3 Dokonalé spalování tuhých a kapalných paliv 34
   5.4 Přebytek spalovacího vzduchu 35
   5.5 Určení vlhkosti ve spalovacím vzduchu 35
   5.6 Určení entalpie vlhkého vzduchu 37
   5.7 Určení entalpie spalin opouštějící kotel 37
   5.8 Určení entalpií vody a vodní páry 38
   5.9 Určení entalpie a výhřevnosti pro kapalné palivo 39
   5.10 Sestavení bilančních rovnic pro konkrétní zadání 40
   5.11 Volba váhové funkce pro korekční vektor 40
6. Testování na datech parogenerátoru 40
   6.1 Metoda projekce gradientu 41
   6.2 Metoda sekvenčního kvadratického programování 41
   6.3 Experiment 41
7 Závěr 43
   Seznam odborné literatury 55

1. Úvod

Kvalita dat získaných měřením stavových veličin, která se vyskytují například v procesech průmyslových odvětví, výrazně ovlivňuje efektivnost navazujících softwarových produktů, sloužících k monitorování a optimalizaci procesů, respektive k jejich samotnému řízení.
Naměřené hodnoty, neboli data veličin určitého procesu, obsahují chyby měření, a tím znehodnocují optimalizační model, který je k řízení procesu používán. Metody sladění dat (data reconsilization) byly vyvinuty jako nástroje sloužící k eliminaci datových nepřesností tak, aby nepřesnostmi ovlivněná data po aplikaci metodiky sladění vyhovovala objektivnímu modelu sledovaného zařízení. Metody sladění dat zpracovávají zejména naměřená data a jsou mezičlánkem mezi fyzickými senzory, které v procesu data snímají a zařízeními, která slouží k jeho monitorování a optimalizaci. První aplikace metody sladění dat jsou známy z odvětví zpracování nerostných surovin a chemického průmyslu, kde nasazení metodiky přinášelo zlepšení efektivity výrobních zařízení.
Cílem této práce je na základě analýzy odborné literatury z oblasti data reconsilization a nelineární optimalizace formulovat metodiku sladění dat s následnou aplikací v tepelné energetice. Realizaci tohoto úkolu jsme rozdělili do několika částí. Jednak jsme se zabývali modely technologických procesů a formulovali úlohu sladění dat pro obecný model i pro konkrétní případ tepelných systémů v kapitole 2. Způsoby řešení formulované úlohy sladění dat jsme analyzovali v kapitole. 3. Testování optimalizačního systému jsme provedli jednak principiálně a dále pak k jednotlivým způsobům řešení úlohy sloužila data konkrétního parogenerátoru. Charakteristiku tvorby modelu a související výsledky této konkrétní aplikace jsme popsali v kapitolách 4 až 6.

2. Formulace problému sladění dat

Aplikace metodiky „data reconsilization“ obecně zlepšuje přesnost dat monitorujících průběh procesu tak, aby po korekci vyhovovala fyzikálním bilancím sestaveným na uvažovaném modelu dané soustavy. Hmotnostní, tepelné i jiné typy bilančních rovnic tvoří implicitní omezení, kterým by vzorky dat naměřené v soustavě měly vyhovovat. Problémem sestavení modelu se zabýváme v kapitole 2.1 a 2.2, pro tento model zařízení jsme formulovali úlohu sladění dat v kapitole 2.3.

2.1 Bilanční rovnice

Výrobní procesy jsou často prolnuty fyzikálními a chemickými zákonitostmi. Jako pro každou součást přírody, platí také pro tyto technologické procesy zákony zachování hmoty, energie, hybnosti i zákony chemické například o stechiometrických a molárních poměrech. Pro vlastní výrobní postup jsou tyto zákony v pozadí automaticky splněny, protože je není možné porušit, a tak není nutné dále zkoumat, zda platí či nikoli. Jejich využití z hlediska sladění dat zkoumaného procesu je orientováno do oblasti metodiky monitorování výrobního procesu jako takového. Snažíme-li se o kontrolu správnosti funkce, je nutné znát stavové veličiny daného systému. Pro měření různých veličin jako jsou teplota, tlak, průtok, koncentrace sálání apod. existují měřící metody, které jsou však obecně zatíženy chybou. Chceme-li snížit neurčitost naměřené veličiny, nebo odhalit hrubou chybu (gross error) v naměřených hodnotách je jednou z možností jak chybu najít využití metodiky sladění dat.
Pro úkol modelování systému s aplikací sladění dat je třeba zařadit systém, respektive formulovat jakou třídu systému modelujeme. Zákony zachování hmoty nebo energie platí pro systémy jak s rozprostřenými tak se soustředěnými parametry. Celá problematika sladění dat

se ve svém základu odvíjí od oblasti chemického průmyslu, kde byla také poprvé použita, a většina praktických aplikací metody je demonstrována v literatuře [1, 2, 3, 4] na příkladech z chemického nebo tepelného průmyslu. Základními prvky provozů v těchto odvětvích jsou různé typy zásobníků, směšovačů, separátorů, přepravních zařízení a tepelných výměníků, což jsou systémy se soustředěnými parametry,.proto je budeme dále uvažovat. Jednotný přístup modeluje všechna zařízení z těchto základních prvků a zavádí pro ně metodiku sestavení bilančních rovnic.

Rozdělíme dále bilanční rovnice (bilance)dle původu do základních kategorií, pro které jsou podstatné určité druhy proměnných:

Hmotnostní bilance

Pro každý systém platí, že hmota se z něj nemůže vytratit (zákon zachování hmoty). Tedy pro každý řez v obecném systému platí rovnice kontinuity v možném zápisu

$$\sum m_{in} + \sum m_S = \sum m_{out} + \sum m_A \,, \tag{2.1.1}$$

kde m_{in} představuje hmotnosti nebo průtoky vstupující, m_S - hmotnost, kterou produkuje uzavřený zdroj, m_{out} - hmotnost vystupující a m_A - je hmotností akumulovanou. Jak je patrné z rovnice (2.1.1), jednotlivé hmotnosti a zdroje se sčítají, a tak hmotnostní bilance má lineární charakter.

Zákon zachování energie

Energie je také veličinou, jejíž množství v systému se zachovává. Energie může přecházet pouze mezi jednotlivými formami, nebo se měnit v mechanickou práci a teplo. Vezmeme-li tudíž libovolný řez v systému, platí pro něj obdoba rovnice kontinuity

$$\sum E_{in} + \sum E_S + Q_{in} = \sum E_{out} + \sum E_A + W_{out} \,, \tag{2.1.2}$$

kde představují: E_{in} - energie a teplo, kterou přinášejí media tekoucí do zvoleného řezu, E_S - teplo nebo energii, která je uvolněna uvnitř řezu, E_{out} - teplo a energii obsažená v mediích, které z řezu vystupují, Q_{in} - teplo vstupující z okolního prostředí, W_{out} - vykonaná práce a E_A - energie akumulovaná v objemu.

Rovnice pro koncentrace

V chemickém procesu jsou látky často v různých koncentracích rozpuštěny v rozpouštědle, které funguje jako přepravní médium. V případech, kdy dochází ke směšování proudů s různými koncentracemi, je možné sestavit bilanci přes látková množství , která jsou unášena jednotlivými proudy. Protože jak průtok, tak koncentrace je pouze měřenou veličinou, je možné i v tomto případě použít metodu sladění dat. Příklad takových bilancí je možné najít například ve [2].

Stechiometrické rovnice pro chemické procesy

Pokud dochází k chemickým reakcím, platí zákon zachování počtu atomů jednotlivých prvků na straně surovin a produktů. Ačkoli stechiometrické koeficienty jednotlivých chemických rovnic se určují pro jednotky atomů, platí stechiometrické poměry i pro molární množství jednotlivých atomů. Metodiku sestavování bilancí v případě chemických rovnic je možné nalézt například v [2, kap. 3].

2.2 Modelování tepelných systémů

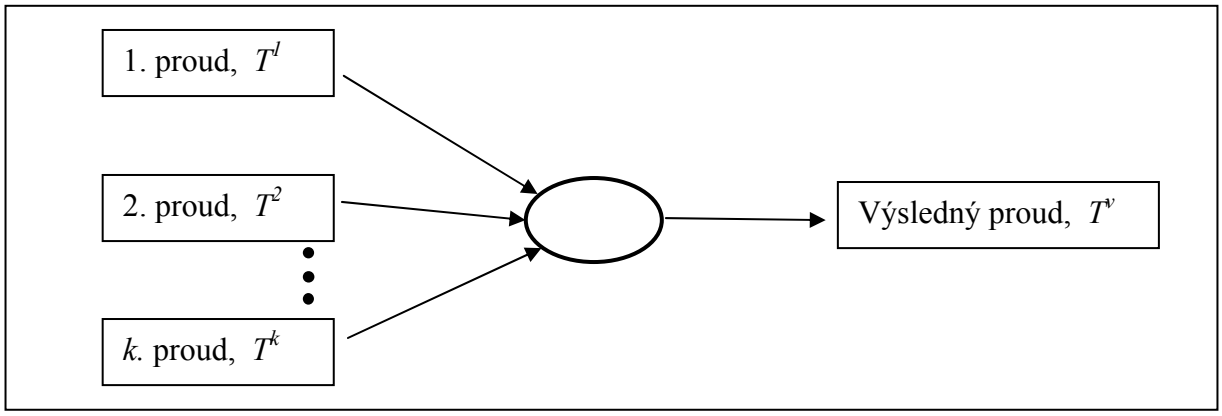
Většinu tepelných systémů můžeme rozložit na jednotlivé prvky - typu zásobník, směšovač, separátor a tepelný výměník (obecně je nazýváme soustředěnými parametry). Stejně jako

v teorii elektrických obvodů je slovo zásobník nebo jiný z prvků pouze abstrakcí, které přiřazujeme vlastnosti reálného zařízení, ale odhlížíme od vlastní fyzické realizace. Je tedy důležité rozpoznat při modelování, o jaký typ prvku nebo kombinaci prvků se jedná a tuto abstrakci potom uvažovanému zařízení přiřadit.
Popíšeme nyní základní prvky tepelných systémů. Jelikož se soustřeďujeme na tepelné toky, pro jednotlivé toky sledujeme průtok přenosového média, teplotu v proudu a měrnou tepelnou kapacitu media, tak bylo možné určit množství tepla, které je v proudu obsaženo.

2.2.1 Směšovač

Uvažujeme zařízení dle obr. 2.2.1, které mísí tepelná media z k proudů. Zatímco vstupující proudy mohou mít vzájemně různé teploty T^1 až T^k, je výsledná teplota vystupujícího proudu jediná, označená T^v. Pro zařízení platí hmotnostní bilance, kterou musí splňovat průtoky m_i jednotlivých proudů

$$\sum_{i=1}^{k} m_i = m_v \,. \tag{2.2.1.1}$$



Obr. 2.2.1 Schéma směšovače

Dále platí zákon zachování energie dle (2.1.2), kde jednotlivá tepla nesená proudy vyjadřujeme pomocí entalpií určená vůči jednotné tepelné hladině. Entalpie sloučeniny se stanovuje pomocí měrné tepelné kapacity proudu jako

$$i_k = m_k c_k T^k \tag{2.2.1.2}$$

kde i_k označuje entalpii za určité teploty proudu, c_k označuje měrnou tepelnou kapacitu a T^k označuje teplotní rozdíl ke zvolené referenční teplotní hladině. Tepelná bilance pro směšovač má tedy tvar

$$\sum_{i=1}^{k} m_k c_k T^k = \sum_{i=1}^{k} m_k c_k T^v \,,$$

který můžeme zapsat v maticové podobě jako

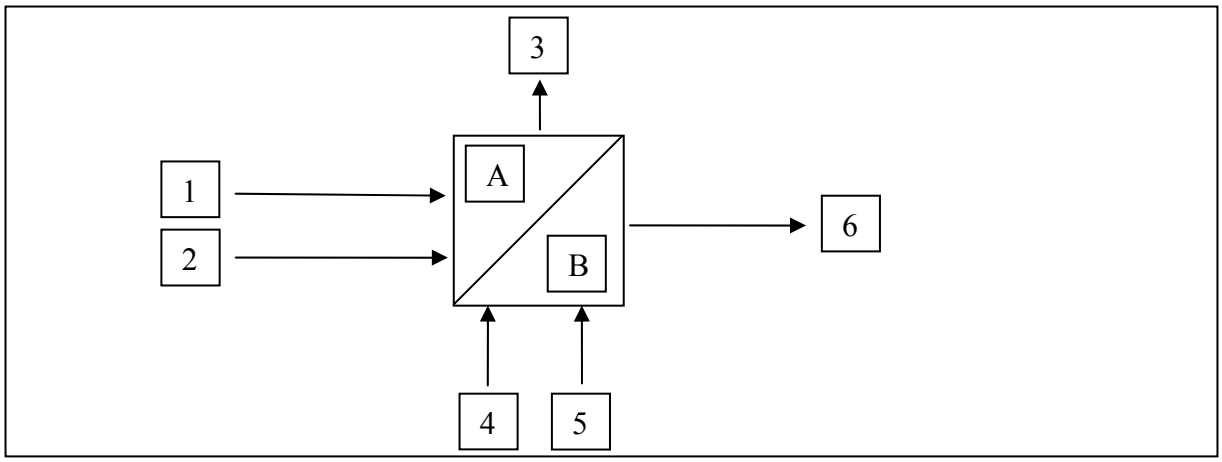
$$\begin{bmatrix} m_1 & \cdots & m_k & m_v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 & \cdots & 0 & -c_1 \\ \mathbf{0} & \ddots & \mathbf{0} & \vdots \\ 0 & \cdots & c_k & -c_k \\ 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T^1 \\ \vdots \\ T^k \\ T^v \end{bmatrix} = 0 \,. \tag{2.2.1.3}$$

Jednotlivé tepelné kapacity, které charakterizují teplo přenášené v tocích, jsou tabulkové hodnoty, jejichž neurčitost je možné v porovnání s měřenými hodnotami zanedbat. Tvar rovnice (2.2.1.3) je bilineární, protože obsahuje pouze násobky dvojic navzájem různých proměnných. Bilineární formu jde přepsat v případě potřeby do některého z následujících ekvivalentních tvarů:

$$\mathbf{xAy} = \begin{bmatrix}\mathbf{x} & \mathbf{y}\end{bmatrix}^T \begin{bmatrix}\mathbf{0} & \mathbf{A} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0}\end{bmatrix} \begin{bmatrix}\mathbf{x} \\ \mathbf{y}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\mathbf{x} & \mathbf{y}\end{bmatrix}^T \begin{bmatrix}\mathbf{0} & \frac{1}{2}\mathbf{A} \\ \frac{1}{2}\mathbf{A}^T & \mathbf{0}\end{bmatrix} \begin{bmatrix}\mathbf{x} \\ \mathbf{y}\end{bmatrix}. \qquad (2.2.1.4)$$

2.2.2 Tepelný výměník

Uvažujeme tepelný výměník obecně dle [2, kap.3], který je možné rozdělit přepážkou do dvou samostatných částí A, B - viz obr. 2.2.2.1, s proudy označenými čísly 1 až 6. Dochází pouze k přenosu tepla dělící stěnou a uvažujeme, že část A má vyšší pracovní teplotu, a proto dodává teplo části označené B. Toto teplo, které se předává, může vznikat přímo spalováním paliva v prostoru A nebo se může jednat o horké produkty například vnějšího spalování.



Obr. 2.2.2.1 Schéma tepelného výměníku

Od schéma z obr. 2.2.2.1 je odvozeno schéma z obr. 2.2.2.2, kde označuje: Q_{pass} - teplo předané z okruhu A do okruhu B. Okruhy teplonosných médií spolu nejsou fyzicky propojeny, a tak je hmotnostní bilanci nutné sestavit pro každý z okruhů zvlášť v řezech, které jsou v obrázku naznačeny červenou elipsou

$$m_1 + m_2 - m_3 = 0\,, \qquad (2.2.2.1)$$

$$m_4 + m_5 - m_6 = 0\,. \qquad (2.2.2.2)$$

V obr. 2.2.2.2 jsou naznačeny dva možné způsoby sestavení tepelné bilance pro tento systém. První možností je sestavení bilance pro vnější (modrý) řez

$$m_1 c_1 T^1 + m_2 c_2 T^2 + m_4 c_4 T^4 + m_5 c_5 T^5 = m_3 c_3 T^3 + m_6 c_6 T^6\,. \qquad (2.2.2.3)$$

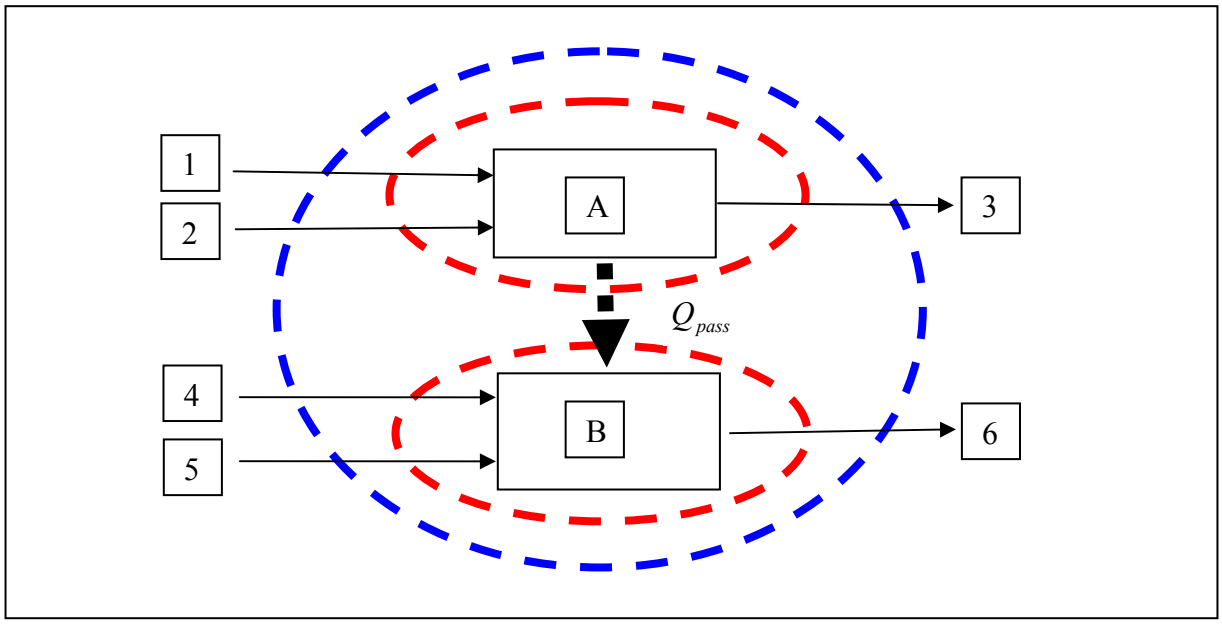
V tom případě je z rovnic vyloučená vnitřní proměnná Q_{pass}. Množství tepla předaného stěnou nelze měřením přímo určit, a proto je to způsob jak vyloučit neměřitelnou proměnnou Q_{pass} z procesu sladění dat.

V druhém případě, kdy známe odhad množství předaného tepla, můžeme využít tuto informaci rozdělením tepelné bilance do dvou rovnic, které sestavíme ve vnitřních (červených) řezech obr. 2.2.2.2) zavedením vnitřní proměnné Q_{pass}

$$m_1 c_1 T^1 + m_2 c_2 T^2 = m_3 c_3 T^3 + Q_{pass} \tag{2.2.2.4}$$

$$m_4 c_4 T^4 + m_5 c_5 T^5 = m_6 c_6 T^6 - Q_{pass}\,. \tag{2.2.2.5}$$

Tento druhý způsob vytvoří dle [2] více informace o proměnných než v případě spojení obou rovnic. Obě varianty použití v sobě obsahují soustavu lineárních rovnic v kombinaci s jednou nebo dvěmi rovnicemi v bilineární tvaru. Pro řešení problému sladění je důležitá vzájemná nezávislost jednotlivých bilančních rovnic. Z toho důvodu musí být jednotlivé rovnice vyjadřující hmotnostní omezení lineárně nezávislé. V případě bilineárních rovnic nesmí být žádná z dvojic rovnic lineárně závislá.



Obr. 2.2.2.2 Schéma tepelného výměníku – varianty bilance

2.3 Sladění dat

Modely tepelných zařízení, které sestavíme pomocí metodiky zavedené kapitolou (2.2), se sestávají vždy ze soustavy rovností pro stavové proměnné. Hmotnostní, tepelné i jiné typy bilančních rovnic tvoří implicitní omezení, kterým by vzorky naměřené v soustavě měly vyhovovat. V případech, kde se uvažují pouze hmotnostní bilanční rovnice, je výsledný model sestaven pouze z lineárních rovnic. Obecný model je však nelineární, složený ze soustavy lineárních a nelineárních rovnic.
Sladění dat je technika zlepšující přesnost dat z procesu tak, aby po korekcích vyhovovala fyzikálním bilancím, které jsou sestaveny pro model dané soustavy.
Mějme obecný model - soustavu m nelineárních bilančních rovnic

$$g_k(\mathbf{x}) = 0 \ , \quad k = 1,...,m \ ,$$

kde $\mathbf{x}$ je n složkový vektor systémových proměnných. Předpokládáme, že funkce $g_k(\mathbf{x})$ jsou libovolné funkce více proměnných, spojité až do druhého řádu. Hodnoty proměnných $\mathbf{x}$ jsou v soustavě měřeny ($\tilde{\mathbf{x}}$) a v ideálním případě by vektor naměřených hodnot $\tilde{\mathbf{x}}$ měl rovnice splnit.

2.3.1 Formulace problému sladění dat

Případ, kdy naměřené hodnoty $\tilde{\mathbf{x}}$ vyhovují soustavě, je řídkým jevem, a proto je možné pokusit se naměřené hodnoty opravit přičtením korekčního vektoru $\hat{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}$, tak aby nové hodnoty $\hat{\mathbf{x}}$ již rovnicím vyhovovaly. Korekční vektor $\mathbf{e}$ nemůžeme získat přímým řešením soustavy rovnic

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \, .$$

Soustava rovnic nemá většinou pouze jedno řešení. Počet omezujících bilančních rovnic je zpravidla menší než počet systémových proměnných, a tak oblast, kde jsou všechny bilance splněny, je početná množina bodů. V případě existence více přípustných řešení stojíme před problémem jak vybrat nejlepší korekci, pokud velikosti jednotlivých komponent vektoru $\mathbf{x}$ nejsou vzájemně porovnatelné. Doplňujícím kriteriem je zde požadavek, aby korekční vektor $\mathbf{e}$ minimalizoval zvolenou normu – aby jeho vážená velikost byla minimální:

$$\mathrm{J}(\mathbf{e}) = \mathbf{e}^T \mathbf{W} \mathbf{e} = (\hat{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{x}})^T \mathbf{W} (\hat{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{x}}).$$

Váhová matice $\mathbf{W}$ je volena jako diagonální. Jednotlivé váhy kompenzují neporovnatelnost jednotek jednotlivých vektorů a jednotlivé váhy mohou potom mít fyzikální význam směrodatných odchylek, ale volba jejich velikosti může být také vykládaná jako tolerance ke změně daného parametru. Diagonální prvky matice $\mathbf{W}$ je možné vyjádřit pomocí směrodatných odchylek σ jako

$$\mathbf{W}_{ii} = \frac{1}{\sigma_i^{\,2}} \, , \ i = 1,...,n \, .$$

Obecně nejsou měřeny všechny proměnné v procesu především z ekonomických důvodů nebo to není například kvůli velkému počtu proměnných zvládnutelné. Odhady těchto neměřených proměnných stejně jako některé parametry modelu jsou často získány jako část problému sladění dat.

Obecná formulace problému sladění dat může být realizována minimalizací

$$\min_{\vec{e}} \ (\mathrm{J}(\mathbf{e})),$$

vzhledem k omezujícím podmínkám ve tvaru

$$\mathbf{g}(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) = \mathbf{0} \, .$$

Minimalizovaná funkce představuje součet vážených druhých mocnin korekcí provedených na měřených hodnotách. Způsoby řešení takto formulovaného problému se zabýváme v kapitole 3.

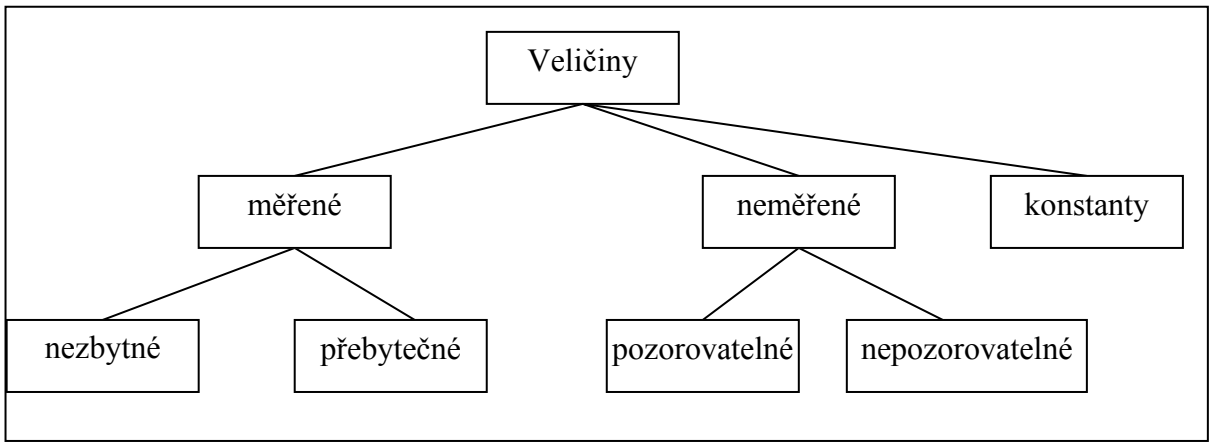
2.3.2 Členění proměnných

Předpokládejme, že máme sestavený model technologického procesu. Naším cílem je roztřídit procesní proměnné do skupin dle dostupnosti jejich hodnot a srovnat v tomto ohledu možnosti lineárního a nelineárního modelu. Proměnné, které v bilančních rovnicích figurují, je možné rozdělit (dle možnosti naměření jejich hodnoty) přímo v procesu. Proměnné, pro jejichž hodnoty je známý odhad ještě před korekcí, mají výhodnější vlastnosti, jelikož korekce na jejich hodnotu jsou relativně malé ve srovnání s proměnnými, u kterých nemáme o počátečním odhadu hodnoty žádnou představu.

Hodnoty některých veličin vystupujících v bilanční rovnici se dají z procesu získat přímým měřením. Veličiny figurující v bilančních rovnicích jsou různé fyzikální podstaty, a tak i měřící metody pro jejich získání se vzájemně liší a mají i různé přesnosti. Přesnost měřící metody není při prvním pohledu důležitá, ale pro další je výhodné ji znát, protože s přesností vzrůstá důvěryhodnost získaného údaje. Jako měřené uvažujeme i veličiny, jejichž hodnoty známe na základě tabulek, protože neustálé měření veličiny není možné (například se nedá provézt okamžitě). Příkladem takové veličiny je například výhřevnost paliva, která se dá určit kalorickou metodou, ale měření není možné provádět v reálném čase. Tabulkové veličiny (třebaže jsou jejich směrodatné odchylky malé, a tím důvěryhodnost vysoká) je možné výpočtem ještě upřesnit. Jiným příkladem jsou veličiny, jejíž hodnota je známá pouze přibližně z předem uvažovaného modelu.

Další skupinu pak tvoří veličiny, jejichž hodnoty neznáme vůbec a jejich hodnotu neumíme získat ani měřením. Veličiny, které jsou neznámé, můžeme rozdělit na dva základní druhy - pozorovatelné a nepozorovatelné.

Poslední podskupinou jsou veličiny, jejichž hodnoty máme zafixované a jejichž hodnota se nemění. Pro ilustraci tohoto rozdělení použijeme schéma obr. 2.3.2.1 převzaté z [1]. V literatuře se používá toto třídění proměnných pro lineární i nelineární bilance.



Obr. 2.3.2.1 Třídění proměnných pro lineární i nelineární bilance

Rozdělení proměnných je společné pro lineární i nelineární modely. Dělení proměnných na měřené a neměřené je potřebné, protože pro neměřené veličiny nemáme výchozí hodnoty, od kterých bychom mohli zavést odchylky. Řešení problému je v lineárním a nelineárním případě nejednotné. Zatímco v lineárním případě je možné neměřenou proměnnou eliminovat ze soustavy rovnic a problém nejprve řešit bez ní, je v nelineárním případě nutné mít nějaký výchozí odhad hodnoty pro neměřené veličiny.

V lineárních modelech je navíc možné do sebe jednotlivé typy proměnných separovat a postupně vyřešit získání měřených i neměřených hodnot nezávisle ve dvou krocích. Postup pro oddělení proměnných v lineárním případě uvádíme v kap. 3.2.

Rozdělení proměnných na pozorovatelné a přebytečné

Paralelně k výše uvedenému rozdělení proměnných, které je možné provést i bez hlubší analýzy problému, zavádí [4, kap.3] rozdělení proměnných na pozorovatelné a přebytečné. Toto rozdělení je pro lineární modely úzce spjato s řešitelností problému sladění dat. Pro velké provozy, kde se vyskytuje velké množství proměnných, není možné snímat hodnoty všech proměnných, které se zde vyskytují. Je tedy dobré rozpoznat, které z neměřených veličin je možné odhadnout. Pojem pozorovatelnosti (observability) tento problém řeší.
Další otázkou je, zda mezi veličinami, které měříme není některá, jejíž hodnotu je možné odvodit z ostatních i bez měření. Taková proměnná je potom nadbytečnou (redundancy). Analýza pozorovatelnosti a měřitelnosti může být využita, pokud se rozhodujeme, kterou množinu proměnných zvolit pro měření.

Definice pozorovatelnosti:

Proměnnou nazveme měřitelnou právě tehdy, když její hodnotu můžeme odhadnout pomocí hodnot ostatních proměnných s využitím bilančních rovnic.

Definice nadbytečnosti:

Proměnnou nazveme nadbytečnou právě tehdy, když je pozorovatelná, třebaže její hodnotu považujeme za neznámou a odstraníme jí.
Z výše uvedených definic plyne, že měřená veličina je pozorovatelná vždy. Neměřená veličina je pozorovatelná pouze tehdy, pokud je možné ji nepřímo spočítat s využitím procesních omezení, která svazují hodnoty jednotlivých proměnných. Měřená hodnota se stává nadbytečnou, pokud její hodnota může být určena s využitím ostatních měření a procesních omezení.

Členění proměnných v případě nelineárních omezení

V systémech, kde soustava sestavených bilancí obsahuje také nelineární rovnice, není členění proměnných natolik jednoznačné. Pokud chceme provádět sladění dat přímo s nezjednodušenými rovnicemi, musíme použít některou z metod nelineárního programování. Protože tyto metody jsou založené na numerických algoritmech, je nutné k jejich použití znát odhady hodnot pro všechny proměnné, neboť jejich velikost chceme vlastně postupem upřesnit. V případě neměřitelných proměnných je získání takového odhadu pouze náhodným výběrem startovací hodnoty v oboru možných hodnot.

3. Matematická formulace problému

3.1 Odvození minimalizace funkce při nelineárních omezeních

Mějme dánu soustavu m bilančních rovnic pro n proměnných shrnutých do vektoru $\mathbf{x}$. Omezující podmínky jsou obecně dány m nelineárními rovnostmi ve tvaru

$$g_k(\mathbf{x}) = 0, \qquad k = 1,\dots,m. \tag{3.1.1}$$

Dalším vstupem je vektor naměřených hodnot těchto proměnných označený jako $\tilde{\mathbf{x}}$. Dosadíme-li vektor naměřených hodnot $\tilde{\mathbf{x}}$ do bilančních rovnic, nebývají splněny. Hledáme tedy takový vektor korekcí $\mathbf{e}$, který po přičtení k $\tilde{\mathbf{x}}$ pak rovnice splní. Předpokládáme, že korekčních vektorů $\mathbf{e}$ může být více, a proto zvolíme kriterium $J(\mathbf{e})$, dle kterého určíme, jak vhodný vektor $\mathbf{e}$ jednoznačně vybrat. Za optimální vektor $\mathbf{e}$ považujeme ten, který

minimalizuje kriterium při splnění vazebních podmínek, které tvoří soustava zadaných bilančních rovnic. Takto formulovaný problém má pro obecná nelineární omezení pouze numerické řešení.
Dalším úkolem je odvození podmínek, které musí optimální $\mathbf{e}$ splňovat a ověření, zda existuje jednoznačné analytické řešení (získání přesného jednoznačného řešení v uzavřeném tvaru) v případě, kdy soustava bilančních rovnic je tvořena rovnicemi s lineární a bilineární částí.

Hledáme tedy hodnotu vektorové proměnné $\mathbf{e}$ (korekci) tak, aby po jejím přičtení k původnímu vektoru naměřených hodnot $\tilde{\mathbf{x}}$, byly splněny bilanční rovnice (3.1.1), což analogicky k tomuto vztahu má tvar

$$\mathrm{g}_k(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) = 0, \qquad k = 1,\dots,m.$$

Ze všech možných korekcí $\mathbf{e}$ budeme vybírat tu s nejmenší velikostí, respektive korekci $\mathbf{e}$, která minimalizuje kriterium $\mathrm{J}(\mathbf{e})$ ve tvaru

$$\mathrm{J}(\mathbf{e}) = \mathbf{e}^T \mathbf{W} \mathbf{e} \ , \tag{3.1.2}$$

kde $\mathbf{W}$ je čtvercová diagonální positivně definitní váhová matice. Předpokládáme, že všechny funkce $\mathrm{g}_k(\mathbf{x})$ mají kompletní parciální derivace až do druhého řádu spojité. Vytvoříme z funkcí obsažených v soustavě (3.1.1) vektorové pole $\mathbf{g}(\mathbf{x}): R^n \to R^m$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \mathrm{g}_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \mathrm{g}_m(\mathbf{x}) \end{bmatrix}, \tag{3.1.3}$$

a tak můžeme zapsat soustavu omezujících rovnic pro korekci $\mathbf{e}$ též ve vektorové podobě

$$\mathbf{g}(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) = \mathbf{0}. \tag{3.1.4}$$

Hledáme-li minimum funkce (3.1.2) za omezení (3.1.4), můžeme převést problém na minimalizaci bez omezení přidáním dalších m proměnných – Lagrangeových multiplikátorů. Lagrangeovu funkci z původního zadání vytvoříme ve tvaru

$$\mathrm{L}(\mathbf{e}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{e}^T \mathbf{W} \mathbf{e} + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g}(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}). \tag{3.1.5}$$

Jak je dokázáno například v [1] hodnota $\mathbf{e}^*$ minimalizující (3.1.3) minimalizuje i původní kriterium $\mathrm{J}(\mathbf{e})$. Rovnicí pro nalezení takového $\mathbf{e}^*$ jsou Lagrangeovy podmínky.
Podmínkou pro extrém jsou Lagrangeovy podmínky prvního řádu [1, kap. 2.4]. Jejich předpokladem je regulárnost bodu $\mathbf{e}^*, \boldsymbol{\lambda}^*$. Pro regulárnost bodu musí být gradient minimalizované funkce lineárně závislý na gradientech omezujících funkcí. Tento požadavek je možné shrnout do následující rovnice pro hodnosti matic

$$\mathrm{hod}\left[\frac{\partial \mathbf{g}(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e})}{\partial \mathbf{e}}\right]_{\mathbf{e}=\mathbf{e}^*} = \mathrm{hod}\begin{bmatrix} \dfrac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{e}} \\ \dfrac{\partial \mathrm{J}}{\partial \mathbf{e}} \end{bmatrix}_{\mathbf{e}=\mathbf{e}^*}.$$

Počet složek vektoru $\mathbf{e}$ je n a počet omezujících rovností je m. Výsledné matice budou tedy mít n sloupců a m eventuálně $m+1$ řádek. V regulárním bodu musí být tedy gradienty omezení a minimalizované funkce lineárně závislé. Regularitu bodu ověřujeme pouze pro

konkrétní bod. Podmínka rovnosti hodností neumožňuje, nestačí k identifikaci bodu podezřelého z extrému.

Ve stacionárním bodu musí být splněny následující rovnice (3.1.6, 3.1.7) pro derivace Lagrangeovy funkce

$$\frac{\partial \mathrm{L}(\mathbf{e},\boldsymbol{\lambda})}{\partial \mathbf{e}} = \mathbf{0}^T, \tag{3.1.6}$$

$$\frac{\partial \mathrm{L}(\mathbf{e},\boldsymbol{\lambda})}{\partial \boldsymbol{\lambda}} = \mathbf{0}^T. \tag{3.1.7}$$

Dosadíme- li do podmínek (3.1.6, 3.1.7) pro Lagrangeovu funkci $\mathrm{L}(\mathbf{e},\boldsymbol{\lambda})$, získáme soustavu rovnic pro stacionární body problému

$$2\mathbf{W}\mathbf{e} + \frac{\partial \mathbf{g}(\tilde{\mathbf{x}}+\mathbf{e})^T}{\partial \mathbf{e}}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}, \tag{3.1.8}$$

$$\mathbf{g}(\tilde{\mathbf{x}}+\mathbf{e}) = \mathbf{0}, \tag{3.1.9}$$

Původní úloha hledání minima funkce při nelineárních omezeních typu rovností jsme převedli na úlohu hledání extrému bez omezení. Tento nový problém obsahuje více proměnných, celkem $m+n$. Řešením soustavy rovnic (3.1.8, 3.1.9) určíme stacionární bod daný hodnotami vektorů $\mathbf{e}^*$ a $\boldsymbol{\lambda}^*$. Posouzení, o jaký druh extrému se jedná, vyžaduje znalost dalších parametrů extrému. Nehledáme minimum vůči všem proměnným $\mathbf{e}$ a současně i multiplikátorům $\boldsymbol{\lambda}$. Hledáme sedlový bod problému, pro který není Hessova matice druhých derivací funkce $\mathrm{L}(\mathbf{e},\boldsymbol{\lambda})$ positivně definitní, nýbrž je indefinitní. Hledaný bod $\mathbf{e}^*$ představuje minimum vůči množině proměnných $\mathbf{e}$ a naopak $\boldsymbol{\lambda}^*$ maximalizuje funkci vůči množině $\boldsymbol{\lambda}$.

3.2 Odvození minimalizace funkce při lineárních omezeních

Speciálním případem problému formulovaného v předchozím odstavci je řešení vyvážení v systému, jehož bilanční rovnice jsou pouze lineární. Pro případ, kdy známe počáteční odhady všech proměnných, je soustava bilančních rovnic nehomogenní soustavou lineárních rovnic v následujícím tvaru

$$\mathbf{A}\cdot(\tilde{\mathbf{x}}+\mathbf{e}) + \mathbf{b} = \mathbf{0}, \tag{3.2.1}$$

kde $\mathbf{A} \in R^{m\times n}$ je matice soustavy, vektor $\mathbf{b} \in R^{m\times 1}$ a $\tilde{\mathbf{x}}$ je vektor naměřených nebo odhadnutých hodnot všech proměnných. Budeme dále minimalizovat kriterium (3.1.2) za omezení, která jsou shrnuta v rovnici (3.2.1). Cílem je odvodit jednoznačný vztah pro vektor korekcí $\mathbf{e}$, který bude úlohu řešit. Návod tohoto řešení je uveden například v [4, kap.3].

Podle postupu nejprve vytvoříme rozšířené kriterium dle rovnice (3.1.3)

$$\mathrm{L}(\mathbf{e},\boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{e}^T\mathbf{W}\mathbf{e} + \boldsymbol{\lambda}^T\left(\mathbf{A}\cdot(\tilde{\mathbf{x}}+\mathbf{e}) + \mathbf{b}\right). \tag{3.2.2}$$

Nyní dosadíme derivace rovnice (3.2.2) podle předpisu do rovnic (3.1.6, 3.1.7) a získáme

$$2\mathbf{W}\mathbf{e} + \mathbf{A}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}, \tag{3.2.3}$$

$$\mathbf{A}(\tilde{\mathbf{x}}+\mathbf{e}) + \mathbf{b} = \mathbf{0}. \tag{3.2.4}$$

Tuto soustavu rovnic můžeme přepsat do maticového tvaru

$$\begin{bmatrix} 2\mathbf{W} & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{e} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ -\mathbf{b} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} \end{bmatrix}. \tag{3.2.5}$$

Soustava lineárních rovnic má jednoznačné řešení pokud má složená matice

$$\begin{bmatrix} 2\mathbf{W} & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

plnou řádkovou hodnost. Dle předpokladu má matice $\mathbf{W}$ plnou hodnost. Pro splnění požadavku musí mít tedy plnou řádkovou hodnost i matice $\mathbf{A}$. Soustavu je možné rozložit na dva podproblémy Gausovou eliminací tak, že přičteme $\frac{1}{2}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}^T$ násobek prvního řádku k řádku druhému.Tím získáme rovnici pro $\boldsymbol{\lambda}^*$

$$\frac{1}{2}\left(\mathbf{A}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}^T\right)\boldsymbol{\lambda}^* = \left(\mathbf{b} + \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}\right), \tag{3.2.6}$$

odkud můžeme vyjádřit výsledné řešení v následujícím tvaru

$$\boldsymbol{\lambda}^* = 2\left(\mathbf{A}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}^T\right)^{-1}\left(\mathbf{b} + \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}\right), \tag{3.2.7}$$

$$\mathbf{e} = \mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}^T\left(\mathbf{A}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}^T\right)^{-1}\left(-\mathbf{b} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}\right). \tag{3.2.8}$$

Tím jsme získali řešení problému v případě lineárních omezení za podmínek, kdy známe odhad $\tilde{\mathbf{x}}$ pro počáteční hodnoty všech proměnných $\mathbf{x}$.

Pro případy, kdy v systému existují veličiny, pro než neznáme počáteční hodnotu, zavádíme dle [4, kap.3] pojem neměřené veličiny. Pro neměřenou veličinu neznáme počáteční odhad hodnoty, a tak není možné zavést neznámou ve formě odchylky od měřené hodnoty. Neurčitost je u neměřených proměnných nelze reprezentovat jako nulovou váhu v matici $\mathbf{W}$, protože matice $\mathbf{W}$ by nebyla nadále regulární a nebylo by možné použít výsledky (3.2.7, 3.2.8). V případě neměřených veličin je nutné rozdělit soustavu omezujících rovnic (3.2.1) podle typu proměnných vhodně takto

$$\mathbf{A}_e\left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}\right) + \mathbf{A}_u\mathbf{u} + \mathbf{b} = \mathbf{0}, \tag{3.2.9}$$

kde $\mathbf{u}$ představuje l složkový vektor neměřených hodnot, $\mathbf{A}_e \in R^{m\times n}$ a $\mathbf{A}_u \in R^{m\times l}$ jsou konstantní matice a $\mathbf{b} \in R^m$ vyjadřuje konstantní vektor.
Tato úloha se řeší eliminací neměřených veličin. Proces eliminace se nazývá „Crows projection matrix method“, dle [10] (dále ji nazýváme metoda projekční matice). Citovaná metoda se skládá z několika postupných kroků:
Nejprve eliminujeme z rovnice (3.2.9) neměřené veličiny. Najdeme matici $\mathbf{P} \in R^{m\times t}$ splňující rovnost

$$\mathbf{P}\mathbf{A}_u = \mathbf{0}. \tag{3.2.10}$$

Matice $\mathbf{P}$ se nazývá projekční matice. Tato matice musí mít stejný počet sloupců jako je počet omezení a počet řádků t je roven počtu nezávislých vektorů získaných řešením soustavy rovnic

$$\mathbf{A}_u^T\mathbf{x} = \mathbf{0}. \tag{3.2.11}$$

Počet vektorů t závisí na hodnosti $\mathbf{A}_u$ následovně

$$t = m - \mathrm{rank}(\mathbf{A}_u^T)\,. \tag{3.2.12}$$

Sloupce matice $\mathbf{P}$ jsou tedy některou z bází nulového prostoru matice $\mathbf{A}_u^{\ T}$. V případě, že má matice $\mathbf{A}_u$ hodnost rovnu počtu omezujících rovnic, je projekční matice rovna matici nulové. To znamená, že v daném případě nelze najít ani část korekcí pro měřené veličiny. V případě, že tomu tak není, nalezneme libovolnou bázi nulového prostoru $\mathbf{A}_u$ a sestavíme matici $\mathbf{P}$. Předpoklad lineární nezávislosti řádků matice $\mathbf{P}$ je nutný z důvodů řešitelnosti problému s omezeními získanými roznásobením rovnice (3.2.9) maticí $\mathbf{P}$ zleva

$$\mathbf{PA}_e\left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}\right) + \mathbf{PA}_u\mathbf{u} + \mathbf{Pb} = \mathbf{0}\,.$$

Vzhledem k předpokladu (3.2.10) se tato omezení zjednoduší na vztah

$$\mathbf{PA}_e\left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}\right) + \mathbf{Pb} = \mathbf{0}\,, \tag{1.2.13}$$

což znamená, že z původního počtu omezení m jich zbývá t.
Nyní nalezneme minimální korekce minimalizující kriterium (3.1.2) za předpokladů (3.2.13). Řešení lze získat dosazením do rovnic (3.2.7, 3.2.8) , pokud za matici A dosadíme součin $\mathbf{PA}_e$ a za vektor $\mathbf{b}$ součin $\mathbf{Pb}$. Výsledkem je potom řešení vyjadřující velikost korekcí a hodnotu multiplikátorů v následujícím tvaru

$$\boldsymbol{\lambda} = 2\left(\mathbf{PA}_e\mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}_e^{\ T}\mathbf{P}^T\right)^{-1}\left(\mathbf{Pb} + \mathbf{PA}_e\tilde{\mathbf{x}}\right), \tag{3.2.14}$$

$$\mathbf{e} = \mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}_e^{\ T}\mathbf{P}^T\left(\mathbf{PA}_e\mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}_e^{\ T}\mathbf{P}^T\right)^{-1}\left(\mathbf{Pb} + \mathbf{PA}_e\tilde{\mathbf{x}}\right). \tag{3.2.15}$$

Posledním krokem je potom určení neměřitelných veličin. Proto provedeme zpětné dosazení za $\mathbf{e}$ z rovnice (3.2.15) do vztahu (3.2.9)

$$\mathbf{A}_e\left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}_e^{\ T}\mathbf{P}^T\left(\mathbf{PA}_e\mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}_e^{\ T}\mathbf{P}^T\right)^{-1}\left(\mathbf{Pb} + \mathbf{PA}_e\tilde{\mathbf{x}}\right)\right) + \mathbf{A}_u\mathbf{u} + \mathbf{b} = \mathbf{0}\,. \tag{3.2.16}$$

Z této rovnice můžeme vyjádřit neznámé proměnné $\mathbf{u}$. Pro vyjádření je nutné celou rovnici (3.2.16) vynásobit zleva inverzí matice $\mathbf{A}_u$. Protože matice $\mathbf{A}_u$ není čtvercová, regulární, použijeme pro výpočet pseudoinversní matici

$$\mathbf{u} = \left(\mathbf{A}_u^T\mathbf{A}_u\right)^{-1}\mathbf{A}_u^T\left(-\mathbf{b} - \mathbf{A}_e\left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}_e^{\ T}\mathbf{P}^T\left(\mathbf{PA}_e\mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}_e^{\ T}\mathbf{P}^T\right)^{-1}\left(\mathbf{Pb} + \mathbf{PA}_e\tilde{\mathbf{x}}\right)\right)\right). \tag{3.2.17}$$

Pozorovatelnost proměnných $\mathbf{u}$ je potom podmíněna plnou řádkovou hodností matice $\mathbf{A}_u$. Nemá-li matice $\mathbf{A}_u$ plnou hodnost, nemá soustava (3.2.16) pro počet neznámých l dostatečný počet rovnic, a proto nelze některé neměřitelné veličiny z modelu vůbec určit (záleží na konkrétní matici $\mathbf{A}_u$).
Pro metodu projekční matice je možné použít následující zefektivnění spočívající v použití QR rozkladů matic figurujících v rovnicích (3.2.14, 3.2.15). Návod k tomuto rozkladu je uveden například v [4, kap.3].

3.3 Odvození minimalizace funkce při bilineárních omezeních

Předpokládáme, že jednotlivé rovnice v rovnosti (3.1.4) svazují proměnné následujícím způsobem

$$\left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}\right)^T\mathbf{A}_k\left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}\right) + \mathbf{b}_k^T \cdot \left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}\right) + c_k = 0, \qquad k = 1,\ldots,m, \tag{3.3.1}$$

kde pro jednotlivá k se odlišují matice $\mathbf{A}_k$, vektor $\mathbf{b}_k^T$ a konstanta c_k. Matice $\mathbf{A}_k$ je libovolná čtvercová matice rozměru $n \times n$, která má pro bilineární omezení nulovou diagonálu, vektor $\mathbf{b}_k^T$ je rozměru $n \times 1$ a c_k je reálná konstanta. Naším cílem je ověřit, zda existuje analytické řešení pro korekce v případě minimalizace kriteria (3.1.2) za podmínek (3.3.1). Lagrangeova funkce má pak tvar

$$\mathrm{L}(\mathbf{e},\boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{e}^T\mathbf{W}\mathbf{e} + \sum_{k=1}^{m} \lambda_k \cdot \left((\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e})^T \cdot \mathbf{A}_k \cdot (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) + \mathbf{b}_k^T \cdot (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) + c_k \right). \tag{3.3.2}$$

Vyjádříme derivace kriteria (3.3.2) dle proměnných $\mathbf{e}$ a λ

$$\frac{\partial \mathrm{L}(\mathbf{e},\boldsymbol{\lambda})}{\partial \mathbf{e}} = 2\mathbf{e}^T\mathbf{W} + \sum_{k=1}^{m} \lambda_k \left(2(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e})^T \mathbf{A}_k + \mathbf{b}_k{}^T \right), \tag{3.3.3}$$

$$\frac{\partial \mathrm{L}(\mathbf{e},\boldsymbol{\lambda})^T}{\partial \boldsymbol{\lambda}} = \begin{bmatrix} (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e})^T \mathbf{A}_1 (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) + \mathbf{b}_1^T (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) + c_1 \\ \vdots \\ (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e})^T \mathbf{A}_m (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) + \mathbf{b}_m^T (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) + c_m \end{bmatrix}^T. \tag{3.3.4}$$

Dále dosadíme hodnoty (3.3.3, 3.3.4) do podmínek (3.1.6, 3.1.7) pro stacionární bod

$$2\mathbf{e}^T\mathbf{W} + \sum_{k=1}^{m} \lambda_k \left(2(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e})^T \mathbf{A}_k + \mathbf{b}_k{}^T \right) = \mathbf{0}^T, \tag{3.3.5}$$

$$\begin{bmatrix} (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e})^T \mathbf{A}_1 (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) + \mathbf{b}_1^T (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) + c_1 \\ \vdots \\ (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e})^T \mathbf{A}_m (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) + \mathbf{b}_m^T (\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) + c_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{3.3.6}$$

Jelikož rovnice (3.3.6) je shodná s původní soustavou omezení, zapíšeme tuto rovnost kompaktně ve tvaru

$$\mathbf{g}(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}) = \mathbf{0}$$

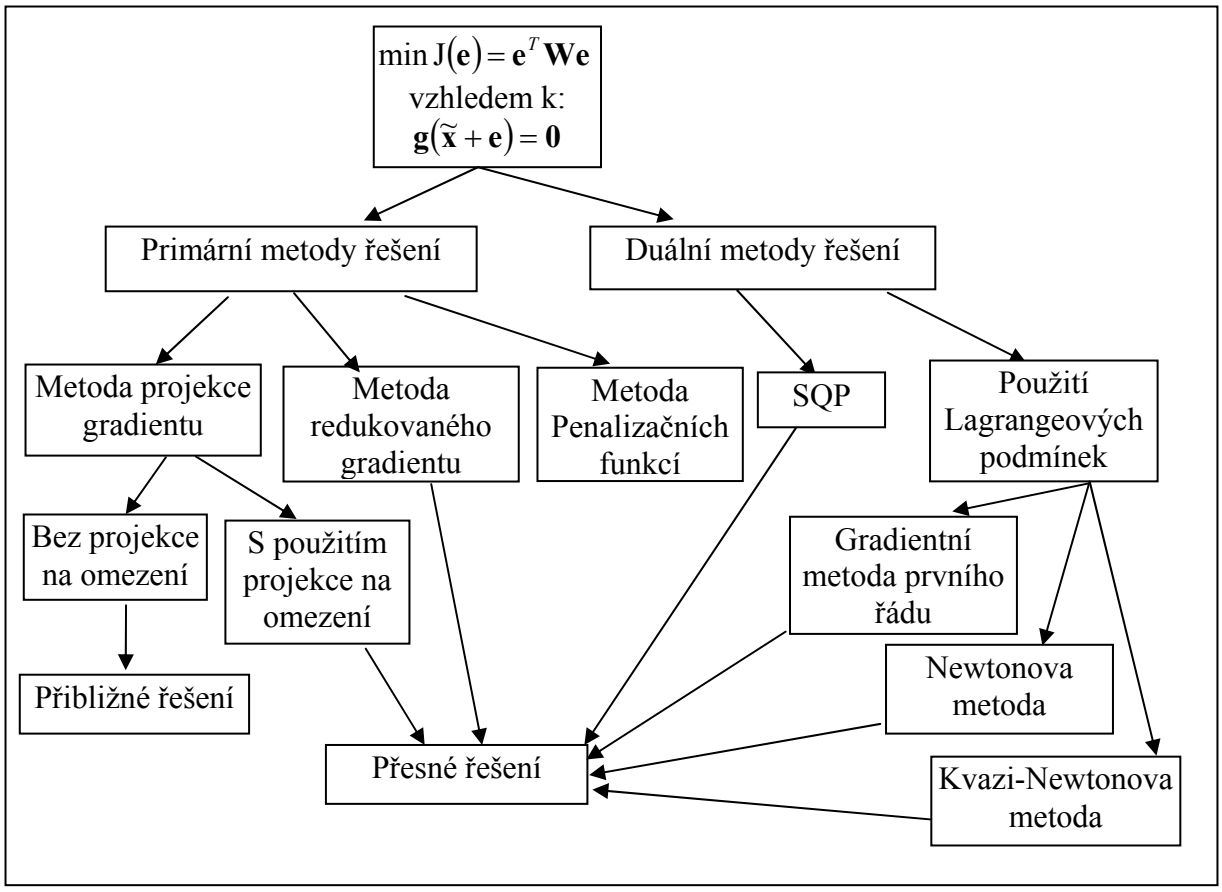
Tato soustava rovnic má všechny rovnice nelineární, obecně kvadratické. Řešení této soustavy není možné najít jednoznačně analyticky, což je z hlediska efektivity řešení nepříznivé.

Pro problém s bilineárními omezeními neexistuje jednoznačné analytické řešení. Pro nalezení řešení je nutné použít některou vhodnou numerickou metodu. V úvahu připadají dva přístupy k řešení problému.

Primární metody minimalizující původní formulaci minimalizace s omezeními. Hledají minimum funkce v dovoleném rozsahu proměnných. Mezi základní primární metody pro minimalizaci funkcí s omezeními typu rovnosti řadíme dle [9] metodu projekce gradientu, metodu redukovaného gradientu a metody penalizačních funkcí.

Duální metody hledají minimum funkce s využitím Lagrangeových podmínek pro extrém funkce (3.1.6, 3.1.7). Řešení je možné hledat přímo řešením soustavy rovnic plynoucích z podmínek (3.1.6, 3.1.7) nebo převedením na problém, který k řešení podmínky využívá. Pro získání minima přímým řešením soustavy nelineárních rovnic plynoucích z (3.1.6, 3.1.7) je

možné použít Newtonovu metodu nebo nějakou z gradientních metod, které budou hledat sedlový bod Lagrangeovy funkce. Další významnou duální metodou je metoda sekvenčního kvadratického programování (SQP), jejíž popis je možné nalézt v [16]. Blokové schéma na obr. 3.3.1 shrnuje tyto varianty řešení problému.



Obr. 3.3.1, Schéma algoritmů nelineární optimalizace při bilineárních omezeních

3.4 Metoda projekce gradientu

Metoda projekce gradientu [9, kap.6] patří mezi metody přímé, která řeší problém minimalizace nelineární funkce za nelineárních omezení. Hledáme minimum funkce (3.1.2) za omezující podmínek daných *m* nelineárními rovnostmi (3.1.4).

Minimalizovaná funkce (3.1.2) je kvadratická. Pro případ kvadratické funkce existuje zjednodušená varianta metody, která je pro naše použití vhodná. Metoda projekce gradientu hledá výslednou korekci $\mathbf{e}$ k vektoru naměřených hodnot $\tilde{\mathbf{x}}$ iteračně. Popíšeme si přechod mezi dvěma po sobě jdoucími řešeními.

Provedeme linearizaci původních nelineárních omezení v okolí nejlepšího odhadu měřených hodnot v k-té iteraci $\mathbf{x}_A^k$. Předpokládáme, že bod $\mathbf{x}_A^k$ je blízký hledaným hodnotám $\hat{\mathbf{x}}$. Zavedli jsme od k-tého odhadu souřadnicový systém s proměnnými $\mathbf{e}_k$, viz obr. 3.4.1.

Funkce v nelineárních rovnicích (1.1.4) můžeme v okolí $\mathbf{x}_A^k$ nahradit Taylorovým rozvojem prvního řádu

$$\mathbf{g}\left(\mathbf{x}_A^k + \mathbf{e}_k\right) \approx \mathbf{g}\left(\mathbf{x}_A^k\right) + \mathbf{C} \cdot \mathbf{e}_k, \tag{3.4.1}$$

kde matice *C* má prvky

$$\mathbf{C} = [\mathbf{C}_{ki}] = \left[\frac{\partial g_k}{\partial x_i} \left(\mathbf{x}_A^k \right) \right]. \tag{3.4.2}$$

Linearizovaná soustava omezení představuje nadrovinu, jejíž počátek souřadnicové soustavy je totožný s bodem $\mathbf{x}_A^k$

$$\mathbf{g}\left(\mathbf{x}_A^k\right) + \mathbf{C} \cdot \mathbf{e}_k = \mathbf{0} . \tag{3..3}$$

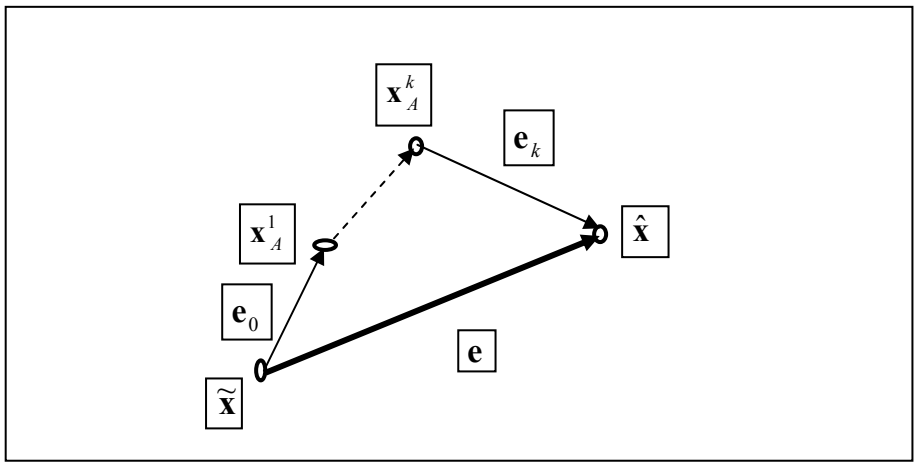
Body v této nadrovině obecně nesplňují žádné z nelineárních omezení uvedená v rovnici (3.1.4). Stejně tak průnik omezení, který je původně těžko popsatelnou množinou bodů, se v linearizované soustavě stane nadrovinou, kterou jde popsat parametricky pomocí počátečního bodu a množiny lineárně nezávislých vektorů. Závěrem je nutné zdůraznit, že minimum, které získáme řešením problému s linearizovanými omezeními, neleží na nelineárních omezeních, ale je pouze vodítkem, kterým směrem se po průniku nelineárních omezení vydat. Pro získání řešení, které je přípustné pro nelineární omezení, je nutné promítnout korekci zpět na průnik nelineárních ploch.
Do původní minimalizované funkce (3.1.2) je nutné dosadit vztah mezi korekcí od naměřených hodnot $\mathbf{e}$ a korekcí od aktuálního odhadu $\mathbf{e}_k$

$$\mathbf{e} = \mathbf{x}_A^k + \mathbf{e}_k \quad .$$

Tím se funkce (1.1.2) změní na funkci proměnné $\mathbf{e}_k$, kterou budeme minimalizovat v k-tém kroku

$$\mathrm{J}_k\left(\mathbf{e}_k\right) = \left(\mathbf{x}_A^k + \mathbf{e}_k\right)^T \mathbf{W} \left(\mathbf{x}_A^k + \mathbf{e}_k\right), \tag{3.4.4}$$

vůči omezením vyjádřeným rovnicí (3.4.3).



Obr. 3.4.1 Označení řešení v jednotlivých krocích

Jeden krok hledání nového výchozího $\mathbf{x}_A^{k+1}$ bodu potom probíhá následujícím způsobem:

1. V okolí původního odhadu správných hodnot $\mathbf{x}_A^k$ provedeme linearizaci omezení dle (1.5.1). Je nutné vyčíslit matici $\mathbf{C}$, definovanou ve vztahu (3.4.2) a vyhodnotit hodnotu vektorové funkce $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ v bodě $\mathbf{x}_A^k$. Následně sestavíme rovnici nové omezující nadroviny dle rovnice (3.4.3).
2. Řešíme problém minimalizace kriteria (1.5.4) za lineárních m omezujících podmínek, daných rovnicí (3.4.3). Odvození řešení problému je formulováno například v kapitole

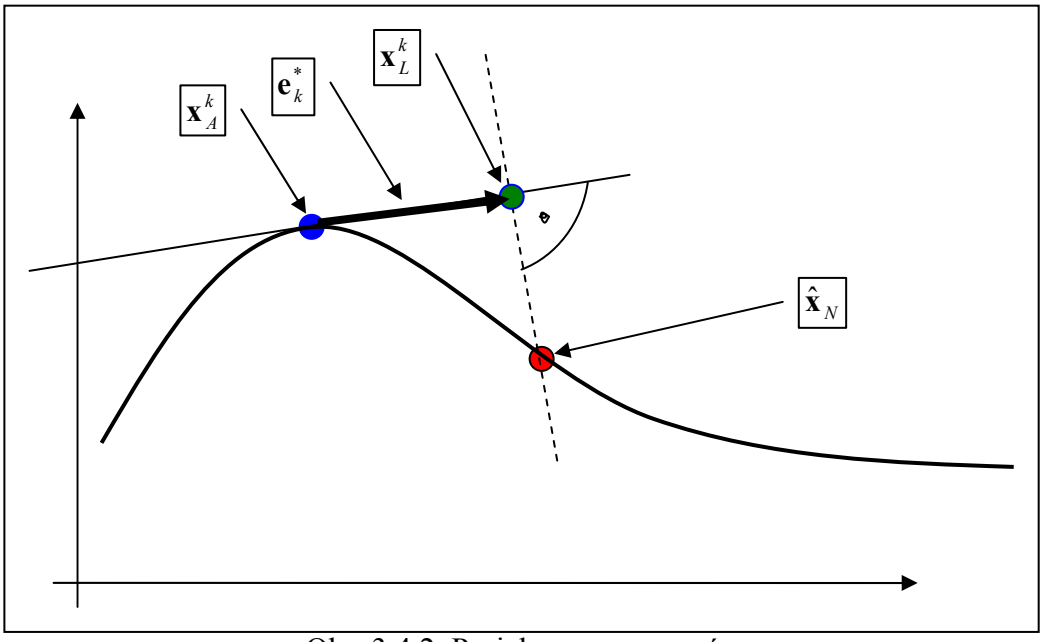
3.2 . Protože minimalizovaná funkce (3.4.4) se odlišuje od (3.1.2), uvedeme zde výsledek odvození

$$\mathbf{e}_k^* = -\mathbf{x}_A^k + \mathbf{W}^{-1}\mathbf{C}^T\left(\mathbf{C}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{C}^T\right)^{-1}\left(-\mathbf{g}\left(\mathbf{x}_A^k\right) + \mathbf{C}\mathbf{x}_A^k\right). \tag{3.4.5}$$

Produktem této minimalizace je vektor $\mathbf{e}_k^*$, pomocí kterého dostaneme možné řešení

$$\mathbf{x}_L^k = \mathbf{x}_A^k + \mathbf{e}_k^*. \tag{3.4.6}$$

3. Ověříme, zda se vektorová funkce $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ v bodu $\mathbf{x}_L^k$ blíží nulovému vektoru. Jestliže jsou omezující podmínky (3.1.4) nově získaným bodem splněny, použijeme bod $\mathbf{x}_L^k$ jako nový startovací odhad pro metodu a znovu pokračujeme od bodu jedna.
4. Pokud nejsou v novém bodě $\mathbf{x}_L^k$ splněna nelineární omezení, je nutné najít nějakou náhradu, která již na nelineárních omezeních leží. Hledání náhradního bodu provedeme kolmým průmětem na množinu, která je průnikem nelineárních omezení. Uvedený postup bude zobecněním myšlenky metody projekce gradientu, která je uvedena v [9] , pro více proměnných. Princip projekce je znázorněn v obr. 3.4.2.



Obr. 3.4.2 Projekce na omezení

Linearizaci omezení kolem počátečního bodu lze geometricky interpretovat tak, že k plochám, které jednotlivá omezení tvoří v prostoru dimenze *n*, vytvoříme tečné nadroviny. Tím, že se od tohoto bodu zavede vektor odchylky $\mathbf{e}_k$, se přesune počátek souřadnicové soustavy do bodu $\mathbf{x}_A^k$. Jelikož navíc předpokládáme, že v počátečním bodu $\mathbf{x}_A^k$ jsou všechna omezení splněna, jsou hodnoty všech nelineárních funkcí v počátku rovny nule a všechny nadroviny procházejí posunutým počátkem souřadnicové soustavy. V jejich průniku leží i bod optima pro lineární podproblém $\mathbf{x}_L^k$. Předpokládáme, že po linearizaci dostáváme soustavu lineárních rovnic, kterou lze zapsat dle (3.4.3) - toto je obecné vyjádření nadroviny pomocí soustavy rovnic. Hledáme nadrovinu kolmou ke všem linearizovaným omezením takovou, aby

procházela bodem $\mathbf{x}_L^k$. V průniku této nadroviny s nelineárními omezeními bude ležet náhradní bod $\hat{\mathbf{x}}_N$. Body ležící v této rovině můžeme parametricky zapsat jako

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_L^k + \mathbf{M}\mathbf{s}, \tag{3.4.7}$$

kde matice $\mathbf{M}$ obsahuje vzájemně lineárně nezávislé vektory, které neleží v rovině lineárních omezení a vektor $\mathbf{s} \in R^{\mathrm{hod}(\mathbf{C})}$ je vektor libovolných parametrů, jejichž počet je předem znám - je roven hodnosti matice $\mathbf{C}$..
Sloupce v matici $\mathbf{M}$ musí být kolmé ke všem linearizovaným omezením. Každé linearizované omezení je tečnou rovinou k nelineárním omezující funkci. Vektor kolmý k tečné nadrovině funkce je roven gradientu funkce v bodě dotyku. Gradienty nelineárních omezení jsou rovny jednotlivým řádkům matice $\mathbf{C}$ (3.4.2).
Jako sloupce do matice $\mathbf{M}$ potom vezmeme hod($\mathbf{C}$) lineárně nezávislých řádků matice $\mathbf{C}$.
Získali jsme popis kolmé nadroviny dle rovnice (3.4.7), získáme náhradní bod $\mathbf{x}_A^{k+1}$ jako průnik nelineárních rovnic (3.1.4) s touto nadrovinou. Dosazením z rovnice (3.4.7) do (3.4.1) získáme soustavu nelineárních rovnic pro koeficienty $\mathbf{s}$ lineární kombinace ve tvaru

$$\mathbf{g}\left(\mathbf{x}_L^k + \mathbf{M}\mathbf{s}\right) = \mathbf{0}\,. \tag{3.4.8}$$

Pro řešení soustavy (3.4.8) existuje přibližné řešení uvedené v [9]

$$\mathbf{s} = -\mathbf{M}^T\left(\mathbf{M}\mathbf{M}^T\right)^{-1}\mathbf{g}\left(\mathbf{x}_L^k\right) \tag{3.4.9}$$

Přesnější hodnoty koeficientů lineární kombinace je nutné získat numericky. Pokud numerická metoda pro hledání kořenu není úspěšná, znamená to, že průnik nelineárních omezení neprotíná kolmou nadrovinu. V tom případě je korekce $\mathbf{e}_k^*$ příliš velikou a je nutné zkrátit její velikost ve zvoleném (například polovičním) poměru a následně s novým bodem $\mathbf{x}_L^k$ hledat nový průsečík s nelineárními omezeními.

Po nalezení hodnot lineární kombinace dostáváme bod minima $\mathbf{x}_A^{k+1}$ jako

$$\mathbf{x}_A^{k+1} = \mathbf{x}_L^k + \mathbf{M}\mathbf{s}\,.$$

5. Druhou možností, která může po nalezení průsečíku s nelineárními omezeními v rovnici (3.4.8) nastat je vzrůst hodnoty minimalizované funkce (3.4.4) ve výsledném bodu $\mathbf{x}_A^{k+1}$. V tomto případě je nutné provézt nové hledání průsečíku se zmenšenou korekcí $\mathbf{e}_k^*$. V případě, kdy se nepodaří po několika zkráceních najít vyhovující průsečík, ukončíme hledání.
6. Iterace končíme pokud mezi dvěma po sobě jdoucími body není rozdíl.

Hodnocení metody linearizace omezení:

Iterační metoda formulovaná v původním zdroji [2], uvádí metodu bez kroku 4. Důvodem tohoto zjednodušení je složitost následného průmětu na omezující množinu. Řešení soustavy velkého počtu nelineárních rovnic může být numericky náročnější než hledání minima funkce. Proto se mu autor vyhýbá a přichází s myšlenkou, že bude sekvenčně provádět linearizaci omezujících funkcí i v bodech, které nelineární omezení nesplní a pokud dojde k poklesu hodnoty minimalizované funkce, vezme toto řešení, třebaže nebude úplně přesné. Pro špatnou startovací hodnotu však nemusí dojít k žádnému zlepšení.

V případě použití celého postupu je metoda podobná myšlence sekvenčního kvadratického programování. Zásadní odlišnost je potom ve schopnosti eliminovat z hledání neměřitelné veličiny, pro které nemáme odhad počáteční hodnoty, což není možné v žádné z ostatních metod.
Jsou-li některá omezení lineární již ve své podstatě, metodou se nezmění.

Aplikace linearizační metody na bilineární omezení

Odvodíme, jak se projeví předchozí postup, v případě bilineárních omezení, která jsou zavedena v (3.3.1). Bilineární omezení splňují předpoklady linearizační metody, protože jsou spojitá až do druhého řádu. Dle rovnice (3.4.1) je nutné provézt linearizaci levé strany v rovnici (3.3.1):

$$\left(\mathbf{x}_A^k + \mathbf{e}_k\right)^T \mathbf{A}_k \left(\mathbf{x}_A^k + \mathbf{e}_k\right) + \mathbf{b}_k^T \left(\mathbf{x}_A^k + \mathbf{e}_k\right) + c_k \approx \left(2\mathbf{x}_A^{k\,T} \mathbf{A}_k + \mathbf{b}_k^T\right)\mathbf{e}_k + \left(\mathbf{x}_A^{k\,T} \mathbf{A}_k \mathbf{x}_A^k + \mathbf{b}_k^T \mathbf{x}_A^k + c_k\right),$$

$$k = 1,\dots,m \ . \tag{3.4.10}$$

Celý problém se tak změnil na problém kvadratického programování, kde hledáme minimum funkce (3.1.2) vzhledem k

$$\begin{bmatrix} 2\mathbf{x}_A^{k\,T} \mathbf{A}_1 + \mathbf{b}_1^T \\ \vdots \\ 2\mathbf{x}_A^{k\,T} \mathbf{A}_m + \mathbf{b}_m^T \end{bmatrix} \mathbf{e} + \begin{bmatrix} \mathbf{x}_A^{k\,T} \mathbf{A}_1 \mathbf{x}_A^k + \mathbf{b}_1^T \mathbf{x}_A^k + c_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_A^{k\,T} \mathbf{A}_m \mathbf{x}_A^k + \mathbf{b}_m^T \mathbf{x}_A^k + c_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{3.4.11}$$

Konkrétní řešení tohoto problému známe ve formě rovnice (3.2.8), nebo je uvedeno v [1, kap.3]. Následně je nutné provézt projekci na původní omezení. Z matice

$$\begin{bmatrix} 2\mathbf{x}_A^{k\,T} \mathbf{A}_1 + \mathbf{b}_1^T \\ \vdots \\ 2\mathbf{x}_A^{k\,T} \mathbf{A}_m + \mathbf{b}_m^T \end{bmatrix}$$

vybereme lineárně nezávislé řádky a dosadíme je do parametrického vyjádření kolmé roviny dle (3.4.7) . Dosadíme-li potom tyto body do rovnic popisující bilineární omezení (3.3.1), získáme soustavu rovnic pro neznámý parametr $\mathbf{s}$ ve tvaru

$$\left(\mathbf{x}_L^k + \mathbf{M}\mathbf{s}\right)^T \mathbf{A}_k \left(\mathbf{x}_L^k + \mathbf{M}\mathbf{s}\right) + \mathbf{b}_k^T \left(\mathbf{x}_L^k + \mathbf{M}\mathbf{s}\right) + c_k = 0\,, \quad k = 1 \dots m\,. \tag{3.4.12}$$

Startovací hodnotou pro iterační řešení problému je hodnota $\mathbf{s} = \mathbf{0}$. Jedná se o soustavu m rovnic s počtem proměnných, který je roven hodnosti matice $\mathbf{M}$.
Druhou možností je použití přibližného výpočtu koeficientů lineární kombinace $\mathbf{s}$ dle (3.4.9). Získaný parametr dosadíme do rovnice (3.4.7) pro nové postupné řešení.

Jako startovací hodnotu $\mathbf{x}_A^0$ pro algoritmus je možné použít i bod $\tilde{\mathbf{x}}$, přestože nesplňuje nelineární omezení. Během projekce na omezení dojde k nalezení přípustného bodu od příští iterace.

3.5 Numerická metoda pokutových funkcí

Cílem je modifikace numerické metody penalizační funkce, uvedené například v [9, kap. 6.4.6], pro řešení problému bilineární bilance. Standardní metoda pokutových

funkcí pouze převede problém na minimalizaci bez omezení a další řešení obecně dále není analyticky možné. Naproti tomu v případě bilineárních omezujících podmínek, kdy rovnice mají stejnou strukturu jako hodnotící kriterium, se pokusíme této vlastnosti využít.
Metoda pokutových funkcí převádí problém minimalizace kriteria (3.1.2) za omezení (3.1.1) na minimalizaci funkce bez omezení přidáním známé penalizační funkce $P(t): t \to \langle 0, \infty)$. Penalizační funkce hodnotí nesplnění omezujících podmínek a v bodech, které nesplňují omezující rovnice zvyšují hodnotu kriteria. Modifikované kriterium má tvar

$$\mathrm{J}^*(\mathbf{e}) = \mathbf{e}^T W \mathbf{e} + \sum_{i=1}^{m} \mathrm{P}_i\left(\mathrm{g}_i\left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}\right)\right). \tag{3.5.1}$$

Zde pro každé z m omezení může být penalizační funkce $\mathrm{P}_i(t)$ jiná. Penalizační funkce se může volit libovolně. Modifikované kriterium (3.5.1) obsahuje nezměněný počet proměnných. V případě, že penalizační funkce pro nenulové hodnoty porostou nade všechny meze, bude se řešení problému (3.5.1) blížit optimálnímu řešení.
Pro bilineární omezení, která jsme definovali vztahem (3.3.1) je výhodné volit všechny pokutové funkce jako lineární ve tvaru

$$\mathrm{P}_i(t) = \alpha_i . |t|, \qquad \alpha_i > 0$$

Zde α_i jsou kladné váhy, kterými poměřujeme nutnost splnění jednotlivých rovnic. Podle poměru velikostí jednotlivých vah budou jednotlivá omezení splněna. Pro bilineární omezení bude mít tedy výsledné kriterium sestavené ze vztahů (3.1.2) a (3.3.1) následující tvar

$$\mathrm{J}^*(\mathbf{e}) = \mathbf{e}^T W \mathbf{e} + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \cdot \left| \left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}\right)^T \cdot \mathbf{A}_k \cdot \left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}\right) + \mathbf{b}_k^T \cdot \left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}\right) + c_k \right|. \tag{3.5.2}$$

Problémem pro analytické řešení je absolutní hodnota ve vztahu (3.5.2), kterou je možné odstranit permutačním způsobem:
Postupně budeme střídat znaménka pro váhu α_i. Výsledné řešení potom musí splnit počáteční předpoklad pro odstranění absolutní hodnoty. Problémem je pak kombinatorická složitost úlohy, která vyžaduje pro získání optimálního řešení odstranění m absolutní hodnot a tím vzniká 2^m případů. Pro každý existuje jednoznačné analytické řešení. Z výsledné množiny vybereme ta řešení, která splní podmínku pro odstranění absolutní hodnoty. Toto řešení se potom blíží optimálnímu pro dostatečně vysoké váhy.

Předpokládáme, že odstraníme absolutní hodnoty přidáním permutačních koeficientů $p_i \in \{-1, 1\}$:

$$\mathrm{J}^*(\mathbf{e}) = \mathbf{e}^T W \mathbf{e} + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \cdot p_i \cdot \left(\left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}\right)^T \cdot \mathbf{A}_k \cdot \left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}\right) + \mathbf{b}_k^T \cdot \left(\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{e}\right) + c_k \right). \tag{3.5.3}$$

Pro takto upravenou funkci dosadíme do základní podmínky pro její extrém

$$\frac{\mathrm{J}^*(\mathbf{e})}{\partial \mathbf{e}} = \mathbf{0}^T .$$

Dosadíme-li do této podmínky, dostaneme

$$2\left(\mathbf{W} + \sum_{k=1}^{m} \alpha_i p_i \mathbf{A}_i\right)\mathbf{e} + \sum_{k=1}^{m} \alpha_i p_i \mathbf{b}_i + 2\left(\sum_{k=1}^{m} \alpha_i p_i \mathbf{A}_i\right)\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{0}, \tag{3.5.4}$$

a odtud získáme analytické řešení za předpokladu regularity matice $\left(\mathbf{W}+\sum_{k=1}^{m}\alpha_i p_i \mathbf{A}_i\right)$ jako

$$\mathbf{e}=-\frac{1}{2}\left(\mathbf{W}+\sum_{k=1}^{m}\alpha_i p_i \mathbf{A}_i\right)^{-1}\left(\sum_{k=1}^{m}\alpha_i p_i \mathbf{b}_i+2\left(\sum_{k=1}^{m}\alpha_i p_i \mathbf{A}_i\right)\tilde{\mathbf{x}}\right) \tag{3.5.5}$$

Pro zvolené váhy α_i tedy musíme nalézt celkem 2^m řešení z nichž některá nebudou přípustná. Z přípustných řešení vybereme za optimální řešení to, pro které má nejmenší hodnotu minimalizovaná funkce (3.1.2).

3.6 Duální metody hledání vázaného extrému

Stacionární bod vázaného extrému je možné nalézt také duálními metodami řešením soustavy nelineárních rovnic (3.1.6, 3.1.7). Neznáme-li analytické řešení této soustavy, je možné tento problém řešit numericky v iteracích. Řešíme zde soustavu $n+m$ rovnic pro $n+m$ proměnných, kterou můžeme zapsat v souhrnném tvaru jako

$$\mathbf{f}(\mathbf{x})=\mathbf{0}\,. \tag{3.6.1}$$

Zde $\mathbf{x}\in R^k$ označuje vektor proměnných a $\mathbf{f}(\mathbf{x}): R^{n+m}\to R^{n+m}$ je vektorová funkce, jejíž jednotlivé složky budeme značit jako $\mathrm{f}_i(\mathbf{x})$. Předpokládáme, že jednotlivé funkce jsou spojité a mají druhé parciální derivace. Hledáme iterační řešení problému, proto označíme řešení v k - té iteraci jako $\mathbf{x}_k$.

Newtonova metoda

Newtonova metoda řeší problém iteračním řešením lineárních podproblémů. Nahradíme-li všechny funkce $\mathrm{f}_i(\mathbf{x})$ Tailorovou řadou prvního řádu

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_k+\Delta\mathbf{x})=\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)+\mathbf{J}(\mathbf{x}_k).(\Delta\mathbf{x}),$$

kde $\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)$ je Jakobiho matice vyhodnocená v bodu $\mathbf{x}_k$. Získáme $n+m$ rovin, v jejichž průniku s nulovou rovinou bude ležet nový bod blížící se více řešení.
Rovnice pro další iterační řešení má tedy tvar

$$\mathbf{x}_k-\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)=\mathbf{x}_{k+1}\,, \tag{3.6.2}$$

a její řešení v případě regularity matice $\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)$ získáme pomocí inverzní matice. V případech, kdy matice není regulární, jsou některé z nadrovin lineárně závislé a. průnikem nadrovin je podprostor. Body, ve kterých je $\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)$ singulární, se nazývají singulární body. V případě, že startovací hodnota se nachází blízko singulárního bodu, Newtonova metoda dle [14] selhává. Aplikujeme-li Newtonovu metodu na soustavu rovnic (3.1.8, 3.1.9) pro stacionární bod Lagrangeovy funkce (3.1.5) získáváme dle [9]

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 \mathrm{L}(\mathbf{e}_k,\boldsymbol{\lambda}_k)}{\partial \mathbf{e}^2} & \dfrac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{e}_k)}{\partial \mathbf{e}} \\ \dfrac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{e}_k)^T}{\partial \mathbf{e}} & \mathbf{0} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{e}_{k+1}-\mathbf{e}_k \\ \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -\dfrac{\partial \mathrm{J}(\mathbf{e}_k)}{\partial \mathbf{e}} \\ -\mathbf{g}(\mathbf{e}_k) \end{bmatrix}. \tag{3.6.3}$$

Newtonova metoda patří mezi metody druhého řádu – pro minimalizaci funkce využívá Hessovy matice.

Modifikované Newtonovy metody

Hlavní nevýhodou Newtonovy metody je nutnost výpočtu Hessovy matice Lagrangeovy funkce. Proto se provádí různé způsoby aproximace Hessovy matice. Možné modifikace metody jsou uvedeny například v [18].

Gradientní metoda

Pro získání stacionárního bodu funkce je možné použít také gradientní metodu. Stacionární bod Lagrangeovy funkce je bodem sedlovým. Vůči proměnným se jedná o minimum a vůči množině multiplikátorů se jedná o maximum. Z toho důvodu je nutné jít pro proměnné proti a pro multiplikátory ve směru gradientu Lagangeovy funkce. Gradient metoda je metodou prvního řádu, využívá pouze gradientu funkce

$$\begin{bmatrix} \mathbf{e}_{k+1} \\ \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_{k} \\ \boldsymbol{\lambda}_{k} \end{bmatrix} + \alpha_k \begin{bmatrix} -\dfrac{\partial \mathrm{L}(\mathbf{e}_k, \boldsymbol{\lambda}_k)}{\partial \mathbf{e}} \\ \mathbf{g}(\mathbf{e}_k) \end{bmatrix}. \tag{3.6.4}$$

Koeficient α_k vyjadřuje délku kroku v prostoru proměnných. Záměrem je, aby bod další iterace byl blíže optimu, aby měl menší hodnotu minimalizované funkce. Z toho důvodu se provádí různá vylepšení, která optimalizují hodnotu parametru α_k. Tyto modifikace se nazývají Line search.

4. Aplikace metody sladění dat na parní generátor

Chceme-li aplikovat metodu sladění na data technologického procesu, je nutné tento proces charakterizovat soustavou bilančních rovnic. Jedná se o úlohu modelování fyzikálního systému a při všech těchto modelovacích úlohách je nutné zvolit určité rozlišovací měřítko generující pak také stupeň složitosti modelovaného problému. Stanovení rozlišovacího měřítka je podmíněno účelem procesu modelování.

4.1 Účel výpočtu

V tomto případě se zabýváme zpřesněním výpočtu účinnosti parního generátoru. Pro tuto úlohu máme k dispozici data určité skupiny senzorů, které mapují tepelné toky v celém zařízení. Úkolem úlohy sladění dat je zpřesnění naměřených dat a na základě těchto údajů zlepšení výpočtu účinnosti parogenerátoru, případně zpřesnění odhadu výhřevnosti užívaného paliva.

Před samotným zahájením modelování je vhodné si položit otázku, co je možné v měřených datech vylepšovat?

Návrh parního generátoru, případně tepelného výměníku, probíhá na základě zadání většinou iteračně (jak vyplývá například z podrobného návodu návrhu parního generátoru ve [14]). Část vstupních údajů, jako jsou například vlastnosti jednotlivých médií, je nahrazena tabulkovými údaji. Například údaje o výhřevnosti paliv jsou pouze průměrnými hodnotami,

kterých bylo dosaženo kalorimetrickými měřeními v laboratorních podmínkách. Zatímco v případě plynných paliv bývá tato hodnota spolehlivá, v případě kapalných a tuhých paliv může hodnota výhřevnosti kolísat v desítkách procent. Výhřevnost paliva je jednou z vlastností, kterou neumíme měřit jinak než laboratorní zkouškou. Protože není možné v reálném čase neustále měřit výhřevnost paliva, které kotel spaluje, je i pro algoritmus řízení dávkování paliva nutné použít konstantní hodnotu. Protože se však jedná pouze o průměrnou hodnotu, je nutné přiřadit tomuto typu dat velkou neurčitost.
Druhou oblastí, kde je možné očekávat zlepšení, je oblast měření průtoků. Ve spalovacích zařízeních jsou obvyklé průtoky plynů, případně kapalin ve velkých průřezech. Chyba takových měření může být podstatná.
Cílem použití sladění dat může být v případě kotle například zlepšení odhadu výhřevnosti na základě bilancí, které systém svazují. Obvykle se předpokládá, že opravená data, která již splňují bilanční rovnice systému, jsou blíže skutečnému stavu, a proto je možné snížit neurčitosti v případě takto opravených dat v eventuálním navazujícím řídícím členu.

4.2 Blokové schéma parního kotle

Pokud chceme pro tepelné zařízení formulovat hmotovou a tepelnou bilanci, není třeba vycházet z detailního technického výkresu zařízení. Je výhodné vyjít z předpokladu, že většina tepla se předává pomocí teplonosných medií a potom je vhodné označit hlavní teplosměnné prvky jako bloky.

Ve zjednodušeném schématu kotle z obr. 4.2.1 mohou být jednotlivé bloky podle konkrétního zadání dále rozvedeny. Podrobnost schématu a počet bloků závisí na znalostech a měřitelnosti toků, které jednotlivými bloky prochází. Jednotlivé šipky zde označují směr toku pracovních látek. Podle druhu čáry se dají odlišit fyzicky oddělené okruhy.

Zároveň je třeba pro všechny značené toky znát veličiny, které jsou nutné pro popis tepla, které s sebou konkrétní toky nesou. Každý tok je specifikován svojí entalpií na jednotkové množství, složením a hmotnostním průtokem. Rozebereme dále, které veličiny jsou pro toky v obr. 4.2.1 postačující.

Nejprve popíšeme procesy v jednotlivých blocích schématu v obr. 4.2.1:

1) Příprava paliva
Druh spalovaného paliva je pro koncepci kotle určující z mnoha ohledů. Základní charakteristikou paliva je jeho výhřevnost. Výhřevnost paliva je většinou při návrhu i řízení uvažovaná jako tabulková hodnota s určitým rozptylem. Pro jednotlivé druhy paliv může být výhřevnost silně závislá na konkrétní dodávce paliva. Pro jednotlivé typy paliv je před vlastním spalováním nutná specifická příprava. Podle druhu paliva obsahuje schéma zařízení prvky k jeho předzpracování. Zpracování paliva před spalováním se odlišuje pro základní druhy paliv.
Při spalování tuhých paliv ve formě prášku je nutné palivo před spalováním rozemlít na prach o velikosti zrn desítek až stovek mikrometrů a usušit. Rozemletí paliva je nutné ke zlepšení prohoření paliva a zmenšení množství popela, který by obsahoval nedohořelé části. Vysoušení paliva zlepšuje vznětlivost paliva. U tuhých paliv se zanedbává teplo (odpovídající předehřátí paliva) - které palivo do spalovací komory vnáší. Výhřevnost tuhých paliv je závislá na nerostném složení paliva, a proto je závislá na konkrétní dodávce, zároveň i míra vlhkosti zde rozhoduje.

U kapalných paliv, mezi která je možné zařadit topné oleje nebo mazut, je obvyklá vysoká viskozita paliva. Minimální teplota pro přepravu například mazutu je kolem 50[°*C*] . Před vlastním spálením je nutné palivo výrazně ohřát tak, aby bylo možné jej rozptýlit z hořáku. Tento ohřev je možné provádět mnoha způsoby. Užívané jsou například elektrický ohřev paliva nebo je palivo před rozptýlením ohříváno párou. Teplo obsažené v kapalném palivu (odpovídající předehřátí paliva) se uvažuje jako tepelný zdroj (pak například výhřevnost mazutu se může lišit v závislosti na způsobu dodání).

Plynná paliva mají ze všech paliv nejstálejší vlastnosti. V přípravě před spalování se plyn čistí od nečistot tzv. „sprchováním“ a čistota paliva je dosažena na úkor zvýšení jeho vlhkosti. Teplo, které si plynné palivo přináší do spalovací komory je zanedbáno. Jelikož se u zařízení zaměřujeme na tepelnou a hmotovou bilanci, je pro nás podstatná hmotnost a výhřevnost paliva proudícího do komory a dále teplo odpovídající předehřátí paliva, které si palivo také přináší s sebou.

2) Spalovací komora

V prostoru spalovací komory dochází ke spalovaní paliva a uvolňování tepelné energie. Tato energie je předávána stěnami výměníku do vodního obvodu, kde je akumulovaná v ohřívané vodě a páře. Vodní okruh má dvě základní části a to buben a přehřívák. V bubnu se z vody tvoří vodní pára, pak je tato pára dále vedena do přehříváku, kde je této – dále výstupní páře, zvýšena entalpie. Část tepla odchází ze spalovací komory obsažena ve spalinách, které mají po opuštění spalovací komory stále značnou teplotu.

3) Buben

Bubnem nazýváme tepelný výměník, v jehož části dochází k přechodu skupenství mezi vodou a parou. Jedná se o přetlakové zařízení. Teplo dodávané procesem spalování vytváří uvnitř rovnováhu mezi parou na mezi sytosti a vodou s teplotou a tlakem na mezi sytosti. Protože dochází k uvolňování páry, která nenese žádné minerální látky, dochází bubnu k postupnému zvyšování koncentrace solí a jiných minerálních látek, které se usazují u dna. Aby nedocházelo k mineralizaci těchto sloučenin a zanášení zařízení je část vody z bubnu odpouštěna jako odpadní voda. Tento čistící proces se nazývá odluh.

4) Odluh z bubnu

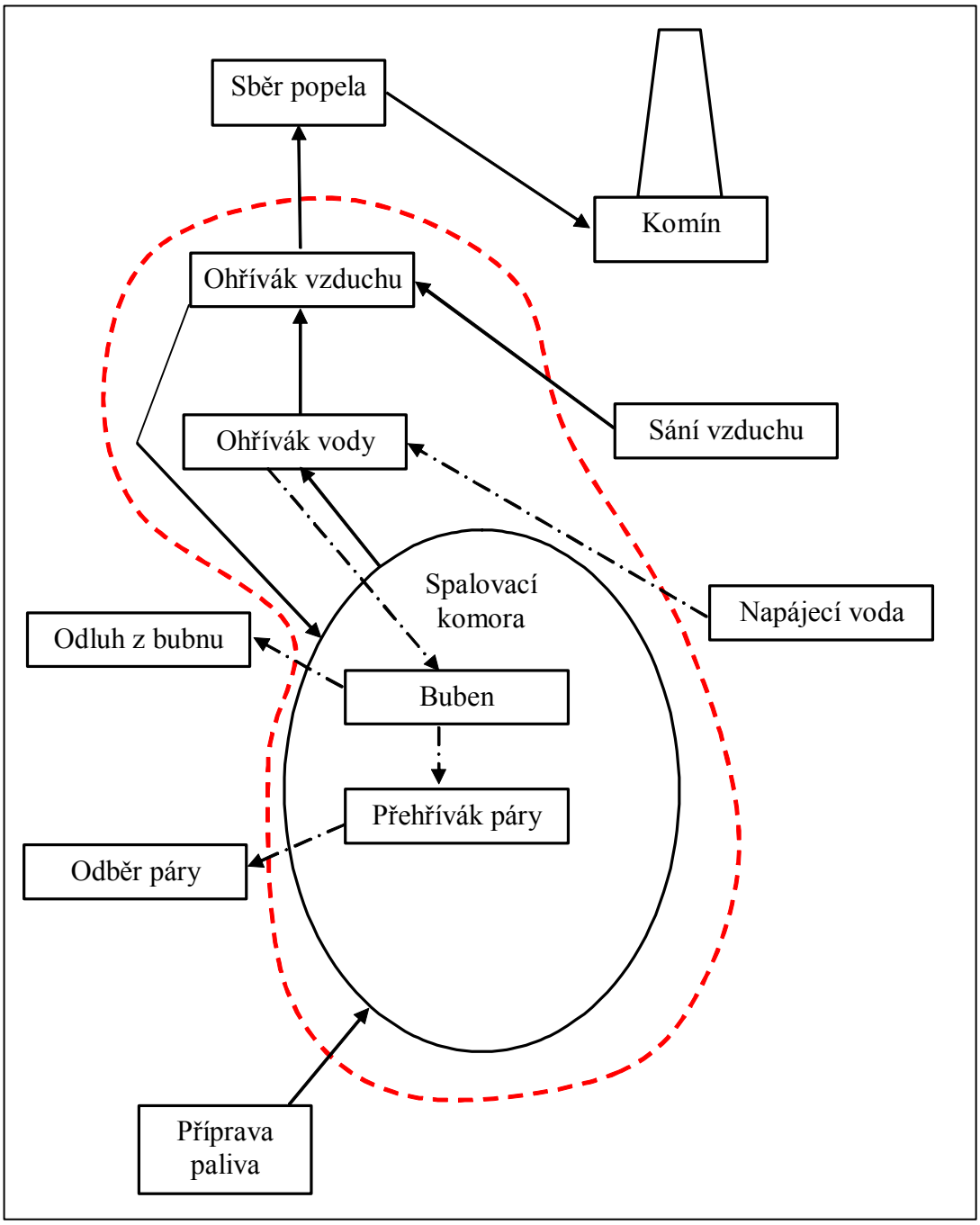
Při odpařování vody v bubnu dochází ke zvyšování koncentrace minerálních látek v prostoru bubnu. Aby nedocházelo k zanášení zařízení, je nutné část vody z bubnu odvádět jako odpadní látky. Tím dochází ke ztrátě části předaného tepla, které není využito ke generaci páry. Pro tepelnou bilanci bude nutné znát entalpii a množství odluhu.

5) Přehřívák

Do přehříváku vstupuje pára generovaná v bubnu. V přehříváku dochází k dalšímu dodávání tepla páře. Předpokládáme, že množství páry, které do přehříváku vstupuje, je shodné s množstvím páry generované v bubnu.

6) Sání vzduchu

Pro spálení je nutné nasát z okolí do spalovací komory dostatek spalovacího vzduchu. Pro dostatečně rychlou reakci spalování je nutné vzduch před přivedením do kotle předehřát. Požadovaná vstupní teplota do spalovací komory je určena typem ohniště a druhem spalovaného paliva. Pro účely sestavení matematického modelu tepelné bilance je nutné znát hmotnost a teplotu vzduchu, který do sání vstupuje z okolního prostředí.



Obr. 4.2.1 Schéma kotle

7) Ohřívák vzduchu a vody

Ohříváky vzduchu a napájecí vody slouží k získávání tepla, které obsahují spaliny po opuštění ohniště. Tím, že předají v tepelném výměníku teplo zpět do spalovacího vzduchu a také tak snižují množství tepla, které bez užitku opouští komín. Je tedy důležité znát výslednou teplotu spalin, které opouštějí komín.

8) Sběr popela

Po průchodu spalin jednotlivým ohříváky vody a spalovacího vzduchu může následovat součást zařízení, která spaliny zbavuje tuhých částí. Tato část se nazývá odprašovák. Jedná se o součást sloužící ekologickým účelům, která efektivitu kotle neovlivňuje.

9) Komín
Po využití spalin k ohřátí k napájecí vody a spalovacího vzduchu dochází k vypuštění spalin do okolí. Teplo, které v ten moment spaliny obsahují, tvoří hlavní ztrátu celého procesu generování páry. Pro určení této ztráty je nutné znát množství spalin a entalpii jednotkového množství spalin. Zatímco standardní výpočty uvažují poměr mezi spalinami a nespáleným vzduchem jako konstantní hodnotu, skutečnost je často jiná. Spotřeba paliva je s časem proměnná a tak poměr mezi nasávaným vzduchem a palivem nemusí být nutně konstantní. Proto provedeme výpočet tepla, které odchází do okolí po jednotlivých složkách, kterými jsou spaliny, suchý přebytečný vzduch a vodní pára. Minimální teplota spalin, které opouštějí komín, je zdola omezena. Prostory komína, kde dochází ke styku se spalinami, jsou vystaveny agresivním podmínkám. Nesmí proto docházet k zanášení a srážení vody, protože by tyto plochy začaly rychle podléhat korozi.

Typ ohniště	Mlecí okruh	Druh paliva	Doporučená teplota [°C]
Práškové	uzavřený, sušení vzduchem	černé a chudé uhlí	300 ÷ 350
		hnědé uhlí, rašelina	350 ÷ 400
		břidlice	250 ÷ 350
	uzavřený, sušení spalinami (ventilátorové mlýny)	hnědé uhlí	300 ÷ 350
	otevřený, sušení spalinami	všechna paliva	≤ 350
Tavicí		všechna paliva	350 ÷ 400
Olejové a plynové		mazut, zemní plyn, vysokopecní plyn	250 ÷ 350

Tab. 4.2.1 Teplota ohřátí vzduchu

4.3 Tepelné ztráty kotle a účinnost

Pro výpočet účinnosti kotle nepřímou metodou je nutné znát druh a velikost ztrát, ke kterým v zařízení může docházet. Standardně se při spalování tuhých paliv dle [14] uvažuje pět základních ztrát :

ztráta mechanickým nedopalem Z_c
ztráta chemickým nedopalem Z_{co}
ztráta sáláním a vedením tepla do okolí Z_{sv}
ztráta fyzickým teplem tuhých zbytků Z_f
ztráta citelným teplem spalin (komínová) Z_k .

V případě kapalných a plynných paliv se počet druhů ztrát redukuje a uvažují se pouze některé. Dále tyto ztráty můžeme specifikovat:

4.3.1 Ztráta mechanickým nedopalem

Tento druh ztráty se uvažuje v případě tuhých paliv. Představuje ztrátu nespálené hořlaviny v tuhých zbytcích. Lze ji určit ze vztahu, viz

$$Z_c = Z_{cs} + Z_{cp} + Z_{cú} + Z_{cr} + Z_{cb} \text{ [-]},$$

kde Z_{cs} - ztráta nedopalem ve škváře nebo strusce (tj. v tuhých zbytcích zachycených v ohništi), Z_{cp} - ztráta nedopalem v popílku (tj. ve frakcích zachycených v průtazích kotle a v odprašováku), $Z_{cú}$ - ztráta nedopalem v úletu (tj. v tuhých zbytcích unášených spalinami pryč z kotelního zařízení), Z_{cr} - ztráta nedopalem v roštovém propadu (vyskytuje se u roštových kotlů, pokud se propad nevrací zpět do ohniště) a Z_{cb} - ztráta uhelným práškem v brýdách (vyskytuje se u práškových kotlů s otevřeným mlecím okruhem, pokud se brýdy neodvádějí společně se spalinami odcházejícími z kotle).

4.3.2 Ztráta chemickým nedopalem

Ztráta chemickým nedopalem Z_{co} [-], jinak též ztráta hořlavinou ve spalinách, vyjadřuje teplo ztracené v důsledku přítomnosti nespálených plynů ve spalinách. Pro její určení se obvykle zjišťuje pouze koncentrace CO ve spalinách, při spalování plynu a dřeva někdy též CH_4. Tyto koncentrace dosahují obvykle velmi malých hodnot - řádově kolem desetiny procenta. Vyšších hodnot mohou nabývat při spalování dřeva, biomasy a paliv s nižší výhřevností, tudíž s nižší teplotou plamene.

4.3.3 Ztráta sáláním a vedením tepla do okolí

Tato ztráta zohledňuje množství tepla, které uniká pláštěm kotle do okolí. Závisí na kvalitě izolace stěn, způsobu oplechování, velikosti povrchu a též na výkonu kotle. Pro předběžný odhad postačí nahradit velikost povrchu kotle jeho jmenovitým parním výkonem M_{pj} [t.h^{-1}] a ztrátu Z_{sv} [-] odhadnout podle druhu nátěru oplechování.

Ztráta sdílením tepla do okolí pro celý kotel se při výpočtu dělí na dílčí ztráty připadající na jednotlivé bilanční objemy, jako např. ohniště, přehříváky, přihříváky, EKO a ohřívák vzduchu.

Absolutní velikost ztraceného tepla prakticky nezávisí na výkonu kotle, neboť teplota povrchu pláště se s výkonem mění jen málo. Proto je nutné poměrně vyjadřovanou ztrátu Z_{sv} při přepočtu dílčích výkonů kotle korigovat podle vztahu

$$Z'_{sv} = Z_{sv} \frac{M_{pj}}{M'_p} \quad \text{[-]},$$

kde M_{pj} a M'_p [kgs^{-1}] označují parní výkon jmenovitý a dílčí, Z_{sv} a Z'_{sv} jsou ztráty sdílením tepla do okolí při jmenovitém a dílčím výkonu. Tento druh ztráty je podobný pro všechny druhy kotlů a dosahuje úrovně přibližně 3% až 5%.

4.3.4 Ztráta fyzickým teplem tuhých zbytků

Tato ztráta se skládá ze shodných položek jako ztráta mechanickým nedopalem: ze ztráty ve škváře či strusce, popílku, úletu a propadu. Zatímco při určení ztráty fyzickým nedopalem se odhaduje zbytková chemická energie, která je ještě vázána v tuhých zbytcích, odhadujeme nyní teplo, které tuhé zbytky obsahují - pokud dojde k jejich odstranění pryč z kotle. Například popel v ohništi může mít teplotu řádově 1000 °C a snažíme se odhadnout, kolik tepla je třeba na ohřátí popela na tuto teplotu (bere se v úvahu v případě kotlů na tuhá paliva).

4.3.5 Ztráta citelným teplem spalin (komínová)

Ztráta komínová představuje teplo odcházející z kotle v kouřových plynech. Jedná se o ztrátu nejvýznamnější, která nejvíce ovlivňuje výslednou účinnost kotle. Její velikost závisí na teplotě spalin a přebytku vzduchu ve spalinách za kotlem a se zvětšováním velikosti obou parametrů tato ztráta roste. Způsob jejího určování není jednotný a je předmětem dlouholetých diskusí a sporů v odborných kruzích. Komínová ztráta se obvykle počítá ze vztahu

$$Z_k = (1 - Z_c)\frac{I_S^{t_k,\alpha_k} - \alpha_k I_{VZ}}{Q_i} \quad [-], \qquad (4.3.5.1)$$

kde $I_S^{t_k,\alpha_k}$ označuje entalpii spalin při teplotě t_k a přebytku vzduchu α_k za kotlem odečtená z I-t diagramu, I_{VZ} označuje entalpii studeného vzduchu, jejímž odečtením od entalpie spalin se alespoň přibližně kompenzuje zanedbání citelného tepla studeného vzduchu přiváděného do kotle, Q_i označuje výhřevnost paliva, Z_c označuje ztrátu mechanickým nedopalem, viz odstavec 4.3.

Volba teploty pro určení entalpie studeného vzduchu v I-t diagramu není jednoznačná. Vyšší hodnota znamená lepší účinnost, což vyhovuje především výrobcům kotlů. Teoretické odvození naznačuje, že by se mělo jednat o střední teplotu veškerého vzduchu, který se do kotle dostává jako nasávaný a falešný, její přesné určení je však prakticky nemožné. Proto lze doporučit použít pro určení požadované entalpie teplotu nasávaného vzduchu. Při projekčním výpočtu se běžně tato teplota volí 25 až 30 °C.

Z rozboru vztahu pro výpočet komínové ztráty vyplývá, že není zcela korektní. Obsahuje předpoklady o konstantním přebytku vzduchu α_k a stejně tak výhřevnost není přesnou veličinou. Vztah (4.3.4.1) dává mírně nižší hodnotu komínové ztráty, tedy vyšší hodnotu účinnosti kotle, neboť entalpie spalin při stejné teplotě a přebytku vzduchu je vyšší než entalpie vzduchu za stejných podmínek. Tento problém se však týká spíše určování účinnosti kotle měřením při garančních zkouškách apod., kde mohou desetiny procenta rozdílu hrát podstatnou roli.

4.3.6 Účinnost kotle

Pro definici účinnosti kotle se používají dvě možné definice. Jedná se o účinnost určenou přímým a nepřímým způsobem.

V případě výpočtu účinnosti přímým způsobem se určuje účinnost jako množství energie předané vzhledem k energii dodané potenciálně do systému. V případě parního generátoru je produktem rozdíl entalpií páry (opouštějící generátor) a napájecí vody, která do systému vstupuje.

$$\eta_p = \frac{i_{pp} m_{pp} - i_{nv} m_{nv}}{Q_i m_{fuel}} \quad [-], \qquad (4.3.6.1)$$

zde m_{pp} [kgs^{-1}] - průtok přehřáté páry, i_{pp} [kJkg^{-1}] - entalpie přehřáté páry na jeden kilogram páry, m_{nv} [kgs^{-1}] - průtok napájecí vody, i_{nv} [kJkg^{-1}] - entalpie napájecí vody, m_{fuel} [kgs^{-1}] - průtok spáleného paliva, Q_i [kJkg^{-1}] - výhřevnost paliva.

Nepřímá metoda určení účinnosti počítá účinnost zařízení prostřednictvím vyčíslení celkových ztrát zařízení. Zatímco v případě přímé metody je možné výstupní teplo obsažené kvantifikovat, je v případě určování ztrát vše závislé na přibližných odhadech. Ze známé velikosti poměrných tepelných ztrát kotle je možné určit jeho hrubou účinnost nepřímým způsobem podle vztahu

$$\eta_n = 1 - Z_c - Z_{co} - Z_{sv} - Z_f - Z_k \quad [-] \qquad (4.3.6.2)$$

V případě dobře sladěných dat jsou si obě účinnosti rovny.

4.3.7 Výrobní teplo páry

Výrobní teplo páry, které může být též označeno jako celkový tepelný výkon kotle, lze určit podle vztahu

$$Q_v = m_{pp}\left(i_{pp} - i_{nv}\right) + m_o\left(i'_w - i_{nv}\right) + m_{op}\left(i''_p - i_{nv}\right) \text{ [kJs}^{-1}\text{] resp. [kW]}$$

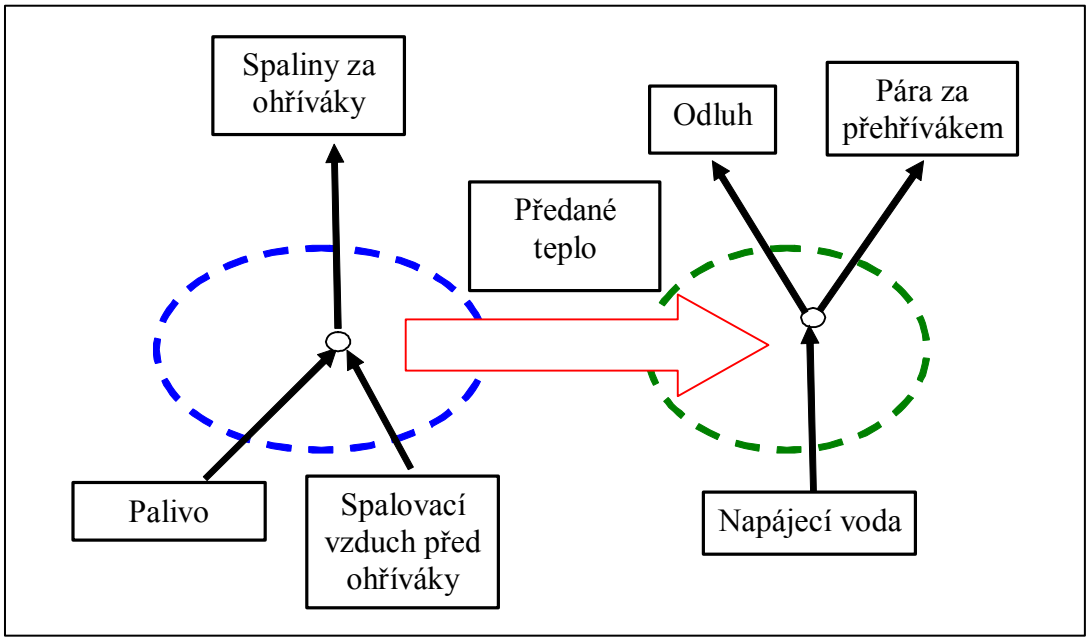
Zde m_{pp} [kgs^{-1}] - průtok ostré páry resp. parní výkon kotle, m_o [kgs^{-1}] - množství odluhované vody z bubnu, m_{op} [kgs^{-1}] - množství odebírané syté páry z bubnu (je-li tento odběr realizován,), i_{pp} [kJkg^{-1}] - entalpie přehřáté páry, i_{nv} [kJkg^{-1}] - entalpie napájecí vody, i'_w a i''_p [kJkg^{-1}] jsou entalpie syté vody a páry při tlaku v bubnu.

Tento výraz není zcela obecný a pro konkrétní zařízení jej lze doplnit přidáním členů, které odvádějí další teplo.

Výrobní teplo páry je ukazatelem, který na základě požadovaného odběru páry odpovídá, kolik paliva je nutné v kotli minimálně spálit pro toto množství.

4.4 Sestavení bilančních rovnic

Pro schéma z obr. 4.2.1 chceme sestavit soustavu bilančních rovnic. O systému uvažujeme jako o tepelném systému. V tepelných systémech platí dva typy bilančních rovnic a to rovnost hmotností a zákon o zachování tepelné energie. Jak je z obr 4.2.1 patrné, vyskytují se v parním generátoru dva základní uzly, pro něž je možné bilanci sestavit. V obr. 4.4.1 jsou naznačené řezy, pro které sestavíme bilanční rovnice.



Obr. 4.4.1 Schéma tepelné bilance kotle

Pro kotel je v prvním přiblížení možné vytvořit dva nezávislé řezy, ve kterých je možné sestavit tepelnou bilanci a hmotnostní bilanci. Na spalovací straně mají jednotlivé bilance následující podobu

$$0 = m_{fuel} Q_i + Q_{fuel} + Q_{vv} - Q_{sp} - Q_{pass}\,, \tag{4.4.1}$$

$$0 = m_{vv} + m_{pal} - m_{sp}\,, \tag{4.4.2}$$

kde Q_i [kJkg^{-1}] je výhřevnost paliva, Q_{fuel} [kJs^{-1}] je teplo v palivu obsažené (uvažujeme pouze u kapalných paliv), Q_{vv} [kJs^{-1}] je teplo obsažené v nasávané studeném vzduchu, Q_{sp} [kJs^{-1}] označuje teplo odnášené spalinami do okolí, Q_{pass} [kJs^{-1}] značí teplo předávané do parního okruhu, m_{fuel} [kgs^{-1}] je průtok spalovaného paliva, m_{vv} [kgs^{-1}] je průtok nasávaného vlhkého vzduchu a m_{sp} [kgs^{-1}] je průtok spalin, které vypouštíme do okolí.

Pro stranu parního okruhu mají bilance následující tvar

$$0 = Q_{pass} - Q_o - Q_{pp}\,, \tag{4.4.3}$$

$$0 = m_{fw} - m_o - m_{pp}\,, \tag{4.4.4}$$

kde Q_o [kJs^{-1}] - teplo obsažené ve vodě vypouštěné v odluhu, Q_{pp} [kJs^{-1}] - teplo obsažené v odebírané páře za přehřívákem páry, m_{fw} [kgs^{-1}] - průtok napájecí vody, m_o [kgs^{-1}] - průtok vody odluhu a m_{pp} [kgs^{-1}] - průtok odebírané páry.

Máme tedy sestavené bilanční rovnice pro soustavu, kterou modelujeme, dalším úkolem je vyjádřit jednotlivé tepelné a hmotnostní toky pomocí veličin, které jsme schopni v systému měřit. Soustava čidel, které systém pro standardní účely monitoruje nemusí nutně snímat všechny tlaky, teploty a průtoky v systému. Některé veličiny je nutné tedy použít na základě tabulkových hodnot. Problematikou určení entalpií jednotlivých toků, které v rovnicích (4.4.1, 4.4.2, 4.4.3, 4.4.4) vystupují, se bude zabývá následující kapitola.

4.5 Analýza výsledného problému

Standardní parní generátor jsem sestavili celkem čtyři bilanční rovnice (4.4.1, 4.4.2, 4.4.3, 4.4.4). Z obecného pohledu představují omezující podmínky, které musí měřené proměnné v systému splňovat. Přenesená tepla a hmotnosti, které v rovnicích figurují je třeba vyjádřit pomocí veličin, které jsme schopni (v provozu) přímo změřit. Teplo přenášené tokem je závislé na tlaku teplotě a množství přenášeného média. Zda budou, nebo nebudou k dispozici všechny určující proměnné, závisí na konkrétním zadání úkolu.
V obecném zadání je nutné pro každý z proudů zjistit, které proměnné jsou měřeny a pro zbylé formulovat (například na základě analogických zařízení) vhodné odhady.

5. Určení entalpií tepelných toků - sestavení bilančních rovnic konkrétního zadání

Rovnice přestavující model parního generátor (4.4.1, 4.4.2, 4.4.3, 4.4.4) obsahují pouze obecné formulace energií, které jsou jednotlivými medii přenášeny. Pro konkrétní výpočet je nutné tato tepla vyjádřit. Konkrétní vyjádření energií je závislé na přesném typu zařízení. Chceme-li vyjádřit tepla přenášená jednotlivými druhy tepelných médií, v každém z nutných kroků bude následovat výpočet pro konkrétní zadané hodnoty parního generátoru.

Postup uvedený v kapitole 5 je identický pro všechny druhy konstrukčních řešení. Odlišnosti pro případ kapalných paliv jsou jmenovány přímo v textu. Náš konkrétní uvažovaný generátor spaluje kapalné palivo – směs Orimulsion. Požíváme terminologii formulovanou ve [14], označení jednotlivých konstant je původní. Technická specifikace testovacího kotle je uvedena v tabulce 5.1.

5.1 Cesta spalovacího vzduchu

Zásadní přísadou pro hoření paliva v kotli je spalovací vzduch, který je do prostoru ohniště nasáván dvěma cestami. Jednak je ventilátory nasáván z venkovního prostoru kotelny a nebo je realizováno přisávání spalovacího vzduchu přímo z prostoru kolem kotle. Vzduch čerpaný z prostoru kotelny má celoročně poměrně stálou teplotu. Oproti tomu teplota okolí kotle, odkud je vzduch čerpán v druhém případě, kolísá, jak spolu s denní dobou, tak i s ročním obdobím. Teplota vstupního vzduchu tedy může kolísat v určitém teplotním rozmezí (je uváděn rozsah mezi -5 až 50 stupni Celsia, viz [11 , str. 205]).

Název	Označení	Velikost	Jednotka
Kapalné palivo Orimulsion výhřevnost	Q_i	28600	[kJkg^{-1}]
Průtok výstupní páry	m_{pp}	79,5	[th^{-1}]
Průtok paliva	m_{fuel}	8	[th^{-1}]
Průtok spalovacího vzduchu	m_{vv}	95	[th^{-1}]
Průtok napájecí vody	m_{fw}	82	[th^{-1}]
Průtok odluhu	m_0	2,5	[th^{-1}]
Teplota paliva	T_{fuel}	60	[°C]
Teplota výstupní páry	T_{pp}	505	[°C]
Teplota spalovacího vzduchu	T_{vv}	75	[°C]
Teplota napájecí vody	T_{fw}	200	[°C]
Teplota v bubnu	T_{bub}	320	[°C]
Tlak výstupní páry	p_{pp}	11	[MPa]
Tlak v bubnu	p_{bub}	11	[MPa]
Teplota spalin	T_{sp}	250	[°C]
Tlak napájecí vody	p_{fw}	11,1	[MPa]

Tab 5.1, Technická specifikace parního generátoru

Po nasátí prochází vzduch ohřívákem spalovacího vzduchu, kde se jeho teplota zvyšuje na teplotu dostatečnou k spalování. Ohřívák vzduchu je součást spalovacího zařízení, ve kterém dochází k předávání nízkopotenciálového tepla spalin (procházejí ze spalovací komory ven do komína) spalovacímu vzduchu, který je ohřívákem dovnitř nasáván. Proces předávání zbytkového tepla se nazývá regenerací. Regenerace tepla ohříváním spalovacího vzduchu se provádí z několika důvodů:

1) Zlepšit a také urychlit sušení tuhých paliv pro spalování

2) Zlepšit jak průběh vzněcování paliva a též jeho vyhoření

3) Zvýšit spalovací úroveň v ohništi i celém spalovacím prostoru

4) Zmenšit komínovou ztrátu.

Zmenšení komínové ztráty je podmíněno tím, že po zavedení regeneračního ohřevu napájecí vody odběrovou parou není možné spaliny napájecí vodou dostatečně ochlazovat, a proto jsou vzduch a palivo jedinými medii, kterým lze ještě teplo s nízkým potenciálem předávat. Regenerací tepla obsaženého v páře stoupne teplota napájecí vody (v závislosti na tlaku) na 165 – 260 °C. Teplotní spád mezi spalinami a napájecí vodou je nedostatečný pro další zvýšení teploty napájecí vody, ale spaliny stále ještě obsahují dostatek tepla. Ovšem pro ohřátí studeného spalovacího vzduchu je tento teplotní spád dostatečný k jeho ohřátí. Zařazením ohříváku vzduchu za ohřívák napájecí vody dosáhneme dostatečného poklesu teploty spalin až na mez, kdy by již docházelo ke srážení nečistot a následně pak i ke korozi zařízení.

5.2 Určení základní energetické hladiny

Teplota okolí, kam je vzduch po spalování vypouštěn, tvoří hladinu, vůči které se určuje nejpodstatnější část tepelných ztrát – tou je ztráta komínová. Teplota ochozích spalin v sobě obsahuje právě tolik ztrát, kolik je rozdíl entalpie nasávaného vzduchu a spalin vypouštěných do okolí. Volba vztažné energetické hladiny není standardizována, protože její volba ovlivňuje výpočet účinnosti spalovacího procesu nepřímou metodou. Za vztažnou hladinu budeme dále považovat teplotu nula stupňů Celsia.

5.3 Dokonalé spalování tuhých a kapalných paliv

Pro spalování paliva existuje jednoznačný poměr mezi množstvím paliva, které máme spálit a množstvím kyslíku, potřebným pro proces hoření. Dávkování paliva a spalovacího vzduchu je spolu tedy provázané. Pro jednotlivé druhy paliv je tabelováno množství atmosférického vzduchu, které je nutné k dokonalému shoření. Uvedená hodnota se nazývá *spotřeba suchého spalovacího vzduchu na jednotkové množství paliva* [11, str. 89] a značíme ji $V_{vs\min}$.

Hodnota $V_{vs\min}$ se stanovuje z chemického složení spalovaného paliva tak, že určuje molární množství kyslíku potřebné k dokonalému shoření jednotlivých hořlavých komponent paliva. Standardně je $V_{vs\min}$ uváděna v tabulkách v jednotkách normované metry krychlové vzduchu na jeden kilogram paliva. Normovaný metr krychlový představuje vzduch o objemu jeden metr krychlový za určité teploty a tlaku. Standardně se užívá tlak 101,325 kPa a teplota 0 °C. Běžný vzduch v atmosféře v sobě obsahuje určité množství vodní páry, ,které zvětšuje entalpii spalovacího vzduchu při určité teplotě. Kvantifikátorem vlhkosti je relativní vlhkost vzduchu, standardně značená φ. Relativní vlhkost vzduchu vyjadřuje poměr parciálního tlaku vodních par ku poměru parciálního tlaku nasycených vodních par za určité teploty.

Tlak nasycených vodních par je závislý na teplotě, a proto je nutné uvádět, za jaké teploty je tato vlhkost uvažována. S rostoucí teplotou je při stejné relativní vlhkosti ve vzduchu obsaženo větší hmotnostní množství vodní páry. Obvyklá relativní vlhkost vzduchu v atmosféře bývá 60% při teplotě 20°C.

5.4 Přebytek spalovacího vzduchu

Ke spálení jednotkového množství paliva je stechiometricky nutný minimální spalovací objem spalovacího vzduchu $V_{vs\,\min}$. Vzduch čerpaný do spalovací komory převyšující toto minimální množství se nespálí, nazývá se přebytek vzduchu. Hmotnost suchého vzduchu potřebnou na prohoření jednotkové hmotnosti paliva označujeme $m_{vs\,\min}$ a je definovaná pomocí hustoty suchého vzduchu ς_{sv} (při tlaku 101,325 kPa a teplotě 0 °C) vztahem

$$m_{vs\,\min} = \frac{V_{vs\,\min}}{\varsigma_{sv}} . \tag{5.4.1}$$

Přebytek spalovacího vzduchu se v kotli pouze ohřívá na teplotu spalin a jako medium nesoucí zbytkové teplo opouští kotel. Přebytek spalovacího vzduchu se v praxi udržuje na přibližně konstantní hladině a standardně je kvantifikován pomocí *součinitele přebytku vzduchu*, který je definován pomocí skutečně vtékajícího množství vzduchu V_{vv} o hmotnosti m_{vv} vztahem

$$\alpha = \frac{V_{vv}}{V_{sv\,\min}} = \frac{m_{vv}}{m_{sv\,\min}} . \tag{5.4.2}$$

Objem i hmotnost nespálené části se přičítá k teoretickému množství spalin, které po spalování opouští ohniště. Standardně se také entalpie spalin opouštějící komín tabeluje jako *energie na kilogram spáleného paliva za určitého přebytku spalovacího vzduchu*.
Pokud je přebytek vzduchu větší, zvětší se tím i komínová ztráta. Pokud chceme zpřesnit výpočet účinnosti, je nutné určovat entalpii směsi spalin a vzduchu opouštějící komín jako součet entalpie jednotlivých složek opouštějících komín. Složky opouštějící komín tvoří spaliny odpovídající množství spáleného paliva, přebytečný vzduch a vodní páry, jejichž množství odpovídá vzdušné vlhkosti obsažené v nasátém vzduchu a množství páry, které je použité pro ohřátí a rozptýlení kapalného paliva.

5.5 Určení vlhkosti ve spalovacím vzduchu

Pro určení komínové ztráty je nutné znát hmotnost vodních par nasátých do kotle obsaženým ve spalovacím vzduchu. Hmotnost vodní páry nasávané do ohniště je možné určit pomocí hmotnostního zlomku páry, jehož definice je uvedena ve [12].
Vstupem pro výpočet hmotnostního zlomku páry je relativní vlhkost vzduchu , teplota T_0 a tlak p_0, při kterých je tato vlhkost uvažována. V konkrétním případě provedeme výpočet pro $\varphi = 0.6$. Teplota jednotkového množství vzduchu pak bude $T_0 = 20$ [°C], $p_0 = 103325$[Pa].
Výpočet hmotnostního zlomku páry probíhá v následujících krocích:

1) Pro zadanou teplotu a tlak nalezneme v tabulkách pro vodu a vodní páru parciální tlak nasycených vodních par. Hodnotu tlaku nasycených vodních par označíme p''_p. Závislost hodnoty parciálního tlaku nasycených vodních par na teplotě pro tlak $p_0 = 103325$[Pa] je možné aproximovat kvadratickou interpolací hodnot tabulky tab.5.5.1.

$T_0\,[°C]$	0	5	10	15	20	25	30	35
$p''_p\,[Pa]$	611.2	872.6	1228.2	1705.8	2339.3	3169.9	4247.0	5629.0

Tab. 5.5.1 Parciální tlak nasycené vodní páry

Pro interpolační polynom druhého řádu jsme získali následující koeficienty:

$$p''_p(T) = 0{,}1108.T^2 - 3{,}6156.T + 141.4572 \text{ [Pa]}.$$

2) Pomocí parciálního tlaku vodních par je stanovena měrná vlhkost vzduchu x

$$x = \frac{r_{sv}}{r_p} \cdot \frac{\varphi.p''_p}{p_{sv}} = 0{,}6219.\frac{\varphi.p''_p}{p_0 - \varphi.p''}, \tag{5.5.1}$$

kde r_{sv} - měrná plynové konstanta suchého vzduchu a r_p - měrná plynové konstanta vodní páry. Poměr r_{sv} a r_p je konstantní, roven 0,6219. Pro teplotu 20 [°C] je uvažována měrná vlhkost 0.0086 [-].

3) Dále určíme hmotnostní zlomek páry a hmotnostní zlomek suchého vzduchu. Hmotnostní zlomek páry je definován pomocí měrné vlhkosti jako

$$\sigma_p = \frac{x}{1+x}. \tag{5.5.2}$$

Hmotnostní zlomek suchého vzduchu je definován vztahem

$$\sigma_{sv} = \frac{1}{1+x}. \tag{5.5.3}$$

Znalost těchto hmotnostních zlomků umožňuje rozdělení hmotnostního toku na tok páry a suchého vzduchu. Při teplotě 20 [°C] je hmotnostní zlomek páry roven 0.0085 [-].a zlomek suchého vzduchu roven 0.9915 [-].
Předpokládáme, že hmotnostní zlomek vodní páry izolovaného množství vlhkého vzduchu v závislosti na teplotě zůstává konstantní. Tím je známa hmotnost nasávané páry a stejně tak hmotnost vstupujícího suchého vzduchu.

4) Chceme-li určit $m_{sv\min}$,viz (5.4.1) - ze spotřeby suchého spalovacího vzduchu $V_{vs\min}$, je nutné znát hustotu suchého spalovacího vzduchu. Hustota suchého vzduchu závisí na tlaku, teplotě a měrné plynové konstantě suchého vzduchu $r_{sv} = 287{,}062$ [m^2.s^{-2}.°C^{-1}].

Hustota suchého vzduchu při tlaku $p_0 = 103325$ [Pa] a teplotě $T = 273{,}15$ [°K] se určí jako

$$\rho_{sv} = \frac{p_0}{r_{sv}.T} = \frac{103325}{287{,}062.273{,}15} = 1{,}3177 [\text{kgm}^{-3}] \tag{5.5.4}$$

a pomocí hustoty suchého vzduchu je dále možné určit m_{vv} jako

$$m_{sv\min} = V_{vs\min}\rho_{sv}. \tag{5.5.5}$$

Pro orimulsion je uvedena tabulková hodnota $V_{vs\min} = 7{,}58$ [Nm^{3}kg^{-1}] a z této hodnoty vychází hmotnost $m_{sv\min}$ suchého vzduchu potřebná pro spálení jednotkové hmotnosti paliva $m_{sv\min} = 9.9887$ [kJkg^{-1}].

Znalost hodnoty $m_{sv\min}$ umožňuje oddělit od sebe vzduch, který při procesu prohoří od vzduchu , který se v prostoru ohniště pouze zahřívá, a proto lze počítat komínovou ztrátu bez nutnosti zadání předpokladu konstantního přebytku vzduchu.

5.6 Určení entalpie vlhkého vzduchu

Pro určení entalpie směsi vodní páry se suchým vzduchem je důležité znát entalpie obou složek. Entalpie suchého vzduchu závisí na teplotě při konstantním tlaku nelineárně. Pro přibližné výpočty se však dle [12] používá linearizovaný vztah vztažený k základní energetické hladině 0°*C*. Entalpie suchého vzduchu závisí na teplotě vztahem

$$i_{sv} = c_{psv} T \, [\mathrm{kJkg^{-1}}], \tag{5.6.1}$$

kde c_{psv} označuje měrnou tepelnou kapacitu za konstantního tlaku. Při tlaku $p_0 = 103325$ [Pa] je $c_{psv} = 1{,}005968$ [kJkg^{-1}°C^{-1}]. Pro vodní páru existuje přibližný vztah, který platí pro nízké parciální tlaky par, které se v atmosféře běžně vyskytují. Vztah

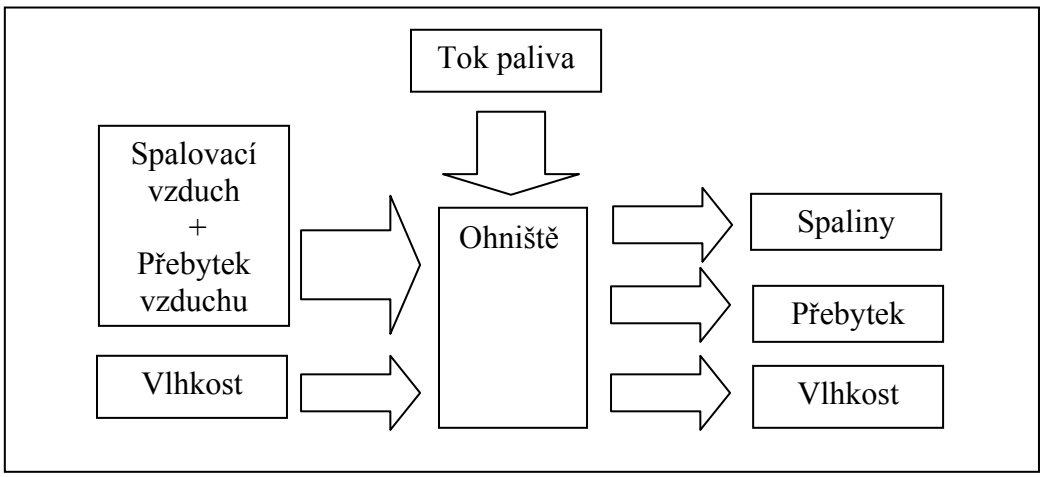
$$i_{vp} = l_{l,g} + c_{pp} T \quad [\mathrm{kJkg^{-1}}] \tag{5.6.2}$$

vyjadřuje entalpii páry za určité teploty T [°C], kde součinitel $c_{pp} = 1{,}884$ [kJkg^{-1}] představuje měrnou tepelnou kapacitu páry za konstantního tlaku a $l_{l,g} = 2500{,}9$ [kJkg^{-1}°C^{-1}] představuje výparné teplo za teploty a tlaku trojného bodu.
Celková entalpie určité hmotnosti nasáté směsy páry a suchého vzduchu označené jako m_{vv} se potom určuje jako součet entalpií jednotlivých složek:

$$i_{vv} = \sigma_p m_{vv} . i_{vp} + \sigma_{sv} m_{vv} . i_{sv} = \sigma_p m_{vv} \left(l_{l,g} + c_{pp} T \right) + \sigma_{sv} m_{vv} \left(c_{psv} T \right) [kJ]. \tag{5.6.3}$$

5.7 Určení entalpie spalin opouštějící kotel

Naším cílem je formulace výpočtu entalpie spalin i_{sp}, které vypouštíme do okolí. Předpokládáme znalost druhu a hmotnosti paliva m_{fuel}, které spalujeme v kotli. Pro dané palivo známe $m_{sv\min}$ a posledním potřebným údajem je hmotnost nasávaného vlhkého vzduchu m_{vv}. Proces spalovaní zobrazuje schematicky na obr.5.7.1.



Obr. 5.7.1 Rozdělení vlhkého spalovacího vzduchu na jednotlivé složky

Je nutné určit entalpii na jeden kilogram suchého vzduchu, který se přemění v ohništi na spaliny. Výpočet je realizován užitím tabulkových hodnot, viz [14], kdy je uvažována známá entalpie spalin připadající na jeden kilogram paliva při určité teplotě i_α^T, za daného přebytku

spalovacího vzduchu α. Dále známe hmotnost minimální spotřeby spalovacího vzduchu pro palivo $m_{sv\min}$.

Nejprve je učena hmotnost m_{preb} nespáleného vzduchu ve spalinách. Součinitel přebytku vzduchu α je definován jako poměr hmotností $m_{sv\min}$ a skutečně nasátého množství vzduchu na jeden kilogram paliva m_{sv}^{α}

$$\alpha = \frac{m_{sv}^{\alpha}}{m_{sv\min}} = \frac{m_{sv\min} + m_{preb}}{m_{sv\min}}. \tag{5.7.1}$$

Z této rovnice dále určíme hmotnost přebytečného vzduchu jako

$$m_{preb} = (\alpha - 1) m_{sv\min}. \tag{5.7.2}$$

Pro určení entalpie spalin při nulovém přebytku vzduchu i_0^T odečteme od i_α^T entalpii přebytečného vzduchu získanou v (5.6.1)

$$i_0^T = i_\alpha^T - c_{psv} T m_{preb}. \tag{5.7.3}$$

Vztah (5.7.3) vyjadřuje entalpii spalin připadající na jeden kilogram spáleného paliva a $m_{sv\min}$ spalovacího vzduchu při tabelované teplotě spalin T_0. Entalpie spalin je na teplotě závislá nelineárně, ale pro malé rozsahy pracovních teplot je možné pro teplotu T_1 použít přibližný vztah

$$i_0^{T_1} = \frac{T_1}{T_0} i_0^{T_0} \left[\mathrm{kJkg^{-1}}\right]. \tag{5.7.4}$$

Proměnná $i_0^{T_1}$ označuje entalpii spalin s nulovým přebytkem vzduchu na jeden kilogram paliva případně na množství $m_{sv\min}$ spalovacího vzduchu, které vstupuje do ohniště.
Ukázkový výpočet je realizován pro palivo orimulsion, které má dle tabulkové hodnoty $i_{1,3}^{200} = 2833{,}8$ [kJkg^{-1}], $m_{sv\min} = 9{,}9887$ [kgkg^{-1}], $\alpha = 1{,}3$, $T_0 = 200\,[°\mathrm{C}]$, $c_{psv} = 1{,}005968$ [kJkg^{-1}]. Dosazením do rovnic (5.7.2) a (5.7.3) byla entalpie určena, $i_0^{200} = 2170{,}1$ [kJkg^{-1}].

Podle druhu zvoleného paliva je tedy možno rozdělit tok spalovacího vzduchu na jednotlivé položky dle schéma na obr. 5.7.1 a pro každou součást vypočítat entalpii i_{sp}, kterou spaliny do okolí vnášejí.

5.8 Určení entalpií vody a vodní páry

Pro sestavení tepelné bilance parního okruhu, viz obr.4.4.1, je nutné určit měrná tepla nesená jednotlivými skupenstvími vody. Voda používaná pro generovaní páry v parních generátorech musí splňovat vyšší kvalitativní normy pro čistou vodu - jak je uvedeno v [11]. K určení entalpie vody použijeme tabulky vody a vodní páry. K sestavení bilance je třeba určit entalpie napájecí vody, vodní páry vystupující z přehříváku a vody použité jako odluh z bubnu.

Určení entalpie napájecí vody

K určení entalpie a měrné tepelné kapacity napájecí vody je důležité znát stavové veličiny, na kterých entalpie závisí. Entalpie kapalin je závislá na teplotě a částečně také na tlaku kapaliny. Pro konkrétní jmenovitou hodnotu tlaku $p_{fw} = 114$ [kgm^{-2}] a teploty $T_{fw} = 193\,[°\mathrm{C}]$ jsme zadali dle tabulek entalpii $i_{fw} = 825{,}5$ [kJkg^{-1}]. Pro napájecí vodu je entalpie lineárně závislá na teplotě, a tak je možné určit měrnou tepelnou kapacitu vody jako

$$c_{fw} = \frac{i_{fw}}{T_{fw}} = \frac{825{,}5}{193}\ \left[\mathrm{kJkg^{-1}\,°C^{-1}}\right]. \tag{5.8.1}$$

Určení entalpie vody v odluhu

Uvnitř bubnu, který je přetlakovým zařízením, existuje dynamická rovnováha mezi vodou a vodní parou. Takový stav se nazývá mez sytosti. Voda za těchto podmínek se pak nazývá *vodou na mezi sytosti* a odebíraná pára podobně *sytou parou*. Na mezi sytosti jsou spolu stavové veličiny teplota a tlak svázány a tak stačí znát pouze jednu z těchto veličin pro určení entalpie určité kapaliny nebo páry. Pro konkrétní jmenovitou hodnotu teploty v bubnu $\overline{T}_{bub} = 320\,[°\mathrm{C}]$ byla dle tabulek stanovena entalpie vody na mezi sytosti $i_o = 1458{,}9$ [kJkg^{-1}] a entalpii odebírané syté páry, která následně vstupuje do přehříváku $i_{svv} = 2705{,}4$ [kJkg^{-1}].
Měrnou tepelnou kapacitu vody v odluhu pak určíme

$$c_0 = \frac{i_0}{\overline{T}_{bub}} = \frac{1458{,}9}{320}\ \left[\mathrm{kJkg^{-1}\,°C^{-1}}\right]. \tag{5.8.2}$$

Určení entalpie vystupující vodní páry

Vodní pára vystupující z přehříváku je přehřátou párou. Závislost entalpie této páry na teplotě již není přímo lineární, ale v úzkém rozsahu teplot ji za lineární považovat můžeme. Pro popis stavu jsou opět nutné dvě veličiny a to teplota $T_{pp} = 520\,[°\mathrm{C}]$ a tlak vodní páry $p_{pp} = 112$ [kgm^{-2}]. Pro tyto jmenovité hodnoty je hodnota entalpie páry vystupující z přehříváku rovna $i_{pp} = 3413{,}8$ [kJkg^{-1}].

5.9 Určení entalpie a výhřevnosti pro kapalné palivo

V případě kapalných paliv, jako je mazut nebo topné oleje, je nutné do bilance počítat také entalpii, kterou si tato paliva přinášejí do spalovací komory. V našem konkrétním případě je palivem orimulsion, pro které uvažujeme měrnou tepelnou kapacitu nezávislá na teplotě jako

$$c_{fuel} = 1{,}85\ \ [\mathrm{kJkg^{-1}°C^{-1}}] \tag{5.9.1}$$

kde T je pracovní teplotou, při které palivo používáme. Pro získání entalpie je nutné povézt integraci rovnice (5.9.1)

$$i_{fuel} = \int_0^T (1{,}85)\,\mathrm{d}\tau = 1{,}85.T\ \left[\mathrm{kJkg^{-1}}\right]. \tag{5.9.2}$$

Další charakteristikou paliva je výhřevnost. Pro orimulsion uvažujeme tabulkovou hodnotu výhřevnosti $Q_i = 28600$ [kJkg^{-1}]

5.10 Sestavení bilančních rovnic pro konkrétní zadání

Formulace konkrétního zadání vyžaduje vyjádřit tepelné toky v rovnicích (4.4.1, 4.4.2, 4.4.3, 4.4.4) pomocí hmotností a teplot jednotlivých médií. Protože známe způsob jak určit entalpie a měrné tepelné kapacity jednotlivých tokům, je možné do rovnic (4.4.1, 4.4.3) dosadit konkrétní měrné tepelné kapacity zavedené zde v odstavcích 5.2 - 5.9

$$0 = m_{fuel}Q_i + \overbrace{m_{fuel}c_{fuel}.T_{fuel}}^{Q_{fuel}} + \overbrace{m_{vv}\left(\sigma_p\left(l_{l,g} + c_{pp}\overline{T}_{vv}\right) + \sigma_{sv}c_{psv}\right)T_{vv}}^{Q_{vv}} -$$

$$\underbrace{- m_{vv}\sigma_p\left(l_{l,g} + c_{pp}T_{sp}\right) - \left(m_{vv}\sigma_{sv} - m_{fuel}m_{sv\min}\right)c_{psv}T_{sp}Q_{sp} - m_{fuel}m_{sv\min}i_0^{T_0}\frac{T_1}{T_0}}_{-Q_{sp}} - , \quad (5.10.1)$$

$$- Q_{pass}$$

$$0 = m_{vv} + m_{pal} - m_{sp}\,, \quad (5.10.2)$$

$$0 = Q_{pass} - \overbrace{m_o c_o T_{bub}}^{Q_o} - \overbrace{m_{pp}\frac{i_{pp}}{\overline{T}_{pp}}T_{pp}}^{Q_{pp}}\,, \quad (5.10.3)$$

$$0 = m_{fw} - m_o - m_{pp}\,, \quad (5.10.4)$$

Zde uvedené vztahy jsou směsí lineárních a bilineárních bilančních rovnic. Všechny rovnice můžeme zapsat dle do tvarů (3.2.1) a (3.3.1). Předpokládáme, že rovnice obsahují jednu neměřitelnou nepozorovatelnou veličinu Q_{pass}.

5.11 Volba váhové funkce pro korekční vektor

Nezbytnou prerekvizitou řešení problému sladění dat je volba váhové matice funkce (3.1.2) pro korekce k měřeným hodnotám. Absolutní velikosti jednotlivých naměřených dat nejsou vzájemně porovnatelné, protože mají rozdílnou fyzikální podstatu. V případě tepelných systémů se jedná zejména

- měření průtoku jednotlivých médií
- měření teplot a tlaků v jednotlivých zařízeních
- odhad výhřevnosti používaného paliva
- odhad množství předané energie

Pro vzájemnou srovnatelnost je nutné váhovou matici volit s ohledem na relativní chybu měření jednotlivých veličin. Matici jsme zvolili v souladu s (2.3.1.1). Směrodatné odchylky jednotlivých měření byly v našem případě k dispozici. Obecně platí, že neurčitosti v případě měření průtoků jsou větší než pro měření teplot a tlaků. Pro odhad výkonu a výhřevnosti jsme volili neurčitosti větší odpovídající relativní chybě měření 15%.

6. Testování na datech parogenerátoru

Soustava bilančních rovnic modelu parogerátoru sestavená v kapitole 5.10, obsahuje dvě lineární a dvě bilineární rovnice. Po zvolení váhové matice dle kapitoly 5.11 jsme získali problém identický s problémem, který jsme řešili v kapitole 3.3 . Přímé analytické řešení tohoto problému není známo a pravděpodobně neexistuje.

Pro řešení problému minimalizace funkce za bilineárních omezení je třeba vybrat některou z přímých nebo nepřímých numerických metod diskutovaných v kapitole 3.3 . Naším úkolem je vybrat metodu, která by co nejlépe vyhovovala bilineární omezením. Porovnání používaných metod, které je uvedeno ve [4], doporučuje pro řešení problému nelineárního sladění použít primární metodu projekce gradientu nebo duální metodu sekvenčního kvadratického programování. Z těchto důvodů jsme provedli srovnání těchto dvou metod. Zkušební programy a data parního generátoru použitá pro testování jsou na přiloženém CD.

6.1 Metoda projekce gradientu

Metoda projekce gradientu, která minimalizuje původní funkci vůči linearizovaným omezením, je v problematice sladění dat dle [1, 4] často využívanou metodou z několika důvodů. Pokud je minimalizovaná funkce kvadratická, má minimalizace vůči linearizovaným omezením jednoznačné analytické řešení (viz. kap. 3.4). V metodě projekce gradientu je možné jednotlivé proměnné rozdělit vzhledem k měřitelnosti do skupin dle kapitoly 2.3.2 a na linearizovaná omezení aplikovat proces eliminace neměřených proměnných uvedený v kapitole 3.2. Při použití eliminace neměřitelných proměnných není třeba znát apriorní odhady neměřitelných proměnných, což vede ke zlepšení výsledků v případech, kdy nemáme žádné odhady na velikost proměnné. Metoda projekce gradientu v upravené podobě pro kvadratickou funkci není obsažena v optimalizačním toolboxu matlabu [5] a z těchto důvodů je nutné ji pro použití implementovat.

6.2 Metoda sekvenčního kvadratického programování

Sekvenční kvadratické programování (SQP) je efektivní, často používaná duální metoda. Metoda řeší minimalizaci obecné nelineární funkce za nelineárních omezení. V literatuře [4] je metoda uvedena jako referenční pro získání přesných výsledků v případech, kdy jsou všechny proměnné měřené nebo je pro ně znám apriorní odhad. Nevýhodou SQP jsou oscilace v okolí řešení v případech, kdy má matice druhých derivací funkce v nějaké oblasti velké rozdíly ve velikosti singulárních čísel – kdy je špatně podmíněna. Metoda SQP je v tom případě citlivá na změnu počátečních podmínek. Pro použití metody SQP je nutné znát odhady všech měřených i neměřených proměnných.

6.3 Experiment

Při aplikaci metody sladění dat na parní generátor je možné použít dvě varianty řešení.
V prvním případě jsme využili pro sladění dat všechny čtyři bilanční rovnice (5.10.1, 5.10.2, 5.10.3, 5.10.4) parního generátoru.
V těchto rovnicích figuruje neměřitelná proměnná Q_{pass}, pro kterou je nutné znát apriorní odhad, ke kterému pak byla následně zavedena vážená korekce. Odhad velikosti předané energie je možné získat pomocí předpokládané energie uvolněné z paliva a účinnosti pro podobný druh spalovacího zařízení

$$Q_{pass} = \eta_p Q_i m_{fuel} .$$

Účinnost parogenerátoru jsme uvažovali $\eta_p = 0{,}9$.

Druhou možností je eliminovat z rovnic neměřitelnou proměnou Q_{pass}. Tu je možné vyloučit z bilančních rovnic (5.10.1, 5.10.3) pro teplo sestavením jediné tepelné bilance pro celé zařízení dle (2.2.2.3). Výsledný počet omezujících rovnic je v tomto případě roven třem.
Kriteriem hodnocení metody je nesplnění jednotlivých bilančních rovnic a hodnota minimalizované funkce pro výslednou korekci Z těchto důvodu jsme testovali data naměřená

v několika po sobě jdoucích intervalech. Takto získaná data se od sebe jen málo lišila, a proto byly též málo odlišné i počáteční podmínky, ze kterých byl výpočet zahájen.
Porovnali jsme obě metody v prostředí matlab. Pro metodu SQP jsme zde využili její implementaci realizovanou v optimalizačním tooloboxu prostředí matlab [5]. Metodu projekce gradientu jsme implementovali samostatně. Metoda SQP je implementována v matlabu pro zcela obecný případ, a tak porovnávání vzájemných výpočtových časů není zcela objektivní. Dává pouze rámcovou představu o počtu nutných operací.

Sladění dat parního generátoru –výpočet účinnosti

Výsledky pokusů jsou prezentovány na obrázcích 6.3.1, 6.3.2, 6.3.3 a 6.3.4. Jednotlivé grafy zobrazují veličiny sledované v procesu před a po opravě v několika po sobě jdoucích intervalech. Vstupní naměřené hodnoty a apriorní odhady neměřených veličin jsou označeny červeně. Opravená data jsou označena modře. Názvy jednotlivých průběhů korespondují s terminologií zavedenou v kapitolách 4 a 5.

Potvrdila se vlastnost metody SQP, pro kterou jsou rovnice při srovnatelných počátečních podmínkách porušovány s proměnlivou velikostí, kterou nelze předem odhadnout. Tento trend je patrný v grafech *respektování jednotlivých bilancí* na obr. 6.3.2 a obr. 6.3.4.
Metoda projekce gradientu se neprojevuje podobnými výkyvy a pro předem stanovenou přesnost nalezne řešení srovnatelné s metodou SQP. Jsou-li mezi bilančními rovnicemi lineární omezení (hmotnostní bilance), jsou tato omezení v případě projekce gradientu vždy splněna z principu, na rozdíl od metody SQP. Výsledky obou metod jsou pro případ použití tří i čtyř bilančních rovnic srovnatelné. Ovšem použití čtyř bilančních rovnic je v případech, kdy máme k dispozici odhad neměřených veličin, výhodnější.

Druhým kriteriem pro srovnání jsme zvolili výpočet účinnosti celého zařízení. Pro vstupní neupravená data nevychází účinnost zařízení určená přímou a nepřímou metodou dle (4.3.6.1, 4.3.6.2) shodně. Většinou je účinnost určená nepřímou metodou větší než účinnost určená metodou přímou. Sladěná data splňují hmotnostní i tepelnou bilanci zařízení. Z toho důvodu výpočty účinnosti přímou a nepřímou metodou budou poskytovat sobě navzájem bližší výsledky. Výsledné účinnosti určené na základě dat zpracovaných oběma užitými metodami tento předpoklad splňují. Ilustrace rozdílu účinností určených přímou a nepřímou metodou, před a po zpracování dat je dokumentovaná v grafech na obr.6.3.5, obr.6.3.6, obr.6.3.7 a obr.6.3.8. Rozdíl mezi účinnostmi před a po zpracování dat se zmenšil.

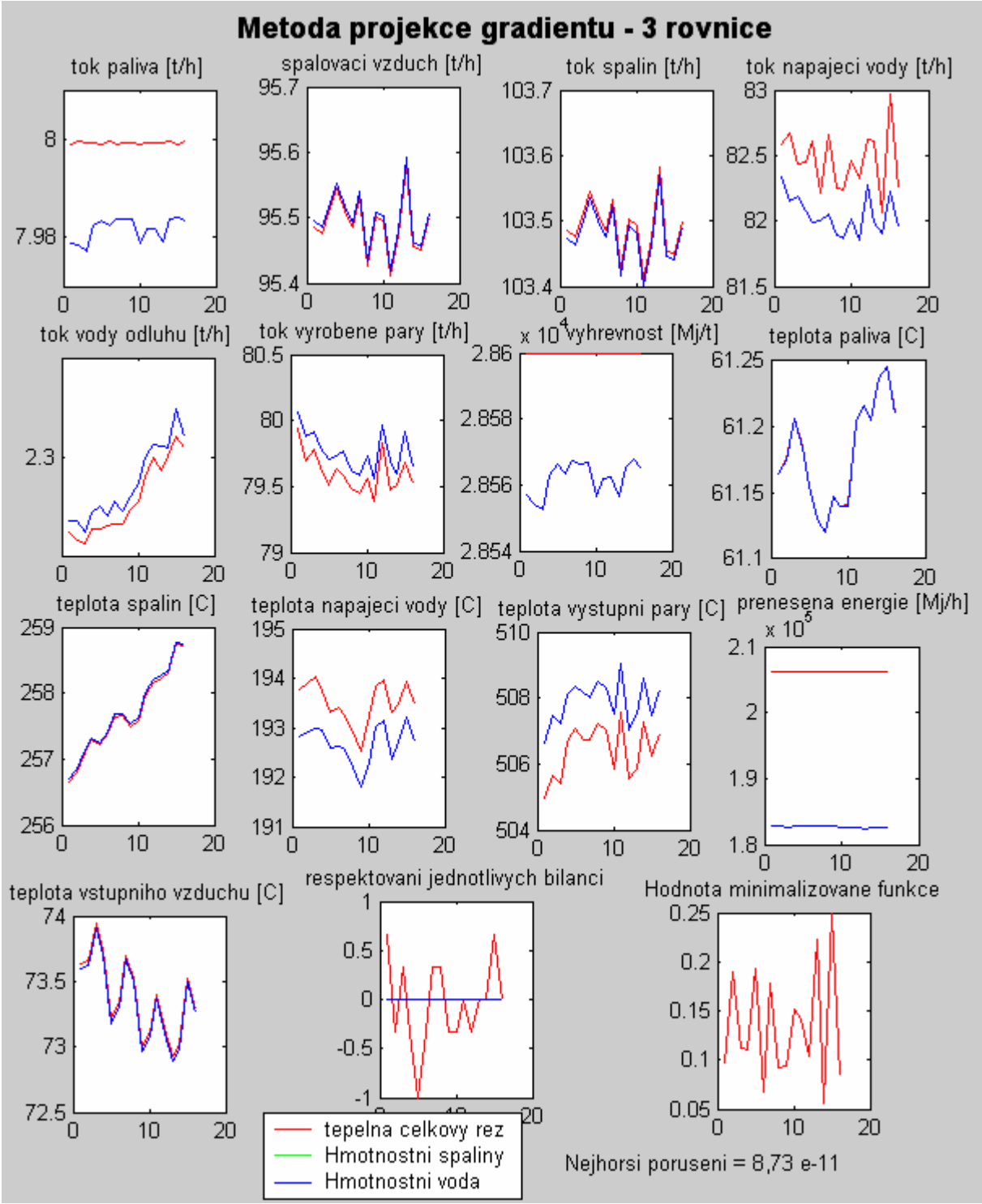
Testování robustnosti numerických metod

Pro testování robustnosti metod jsme zvolili jednu pevnou počáteční hodnotu a pro počáteční podmínky v jejím okolí jsme provedli zkušební řešení. Perturbaci počátečních podmínek jsme realizovali nezávisle v každé proměnné přičítáním náhodných odchylek z normálního rozdělení s nulovou střední hodnotou a směrodatnou odchylkou rovnou 0,02 měřeného rozsahu. Celkem jsme provedli 500 pokusů v okolí startovací hodnoty. Z počátečních i sladěných hodnot jsme vytvořili histogram s rovnoměrně širokými pásy v rozsahu minimální a maximální hodnoty pro každou veličinu. Zároveň jsme sledovali čas potřebný pro jednotlivé výpočty.
Další sledovanou charakteristikou bylo množství nutných iterací a vyhodnocení funkce pro metodu SQP a na druhé straně množství iterací a projekcí na omezeni v případě metody projekce gradientu. Z výsledků testů dokumentovaných v grafech na obr.6.3.9, obr.6.3.10, obr.6.3.11 a obr.6.3.12 pro jednotlivé metody je patrné, že nejsou výrazné časové rozdíly

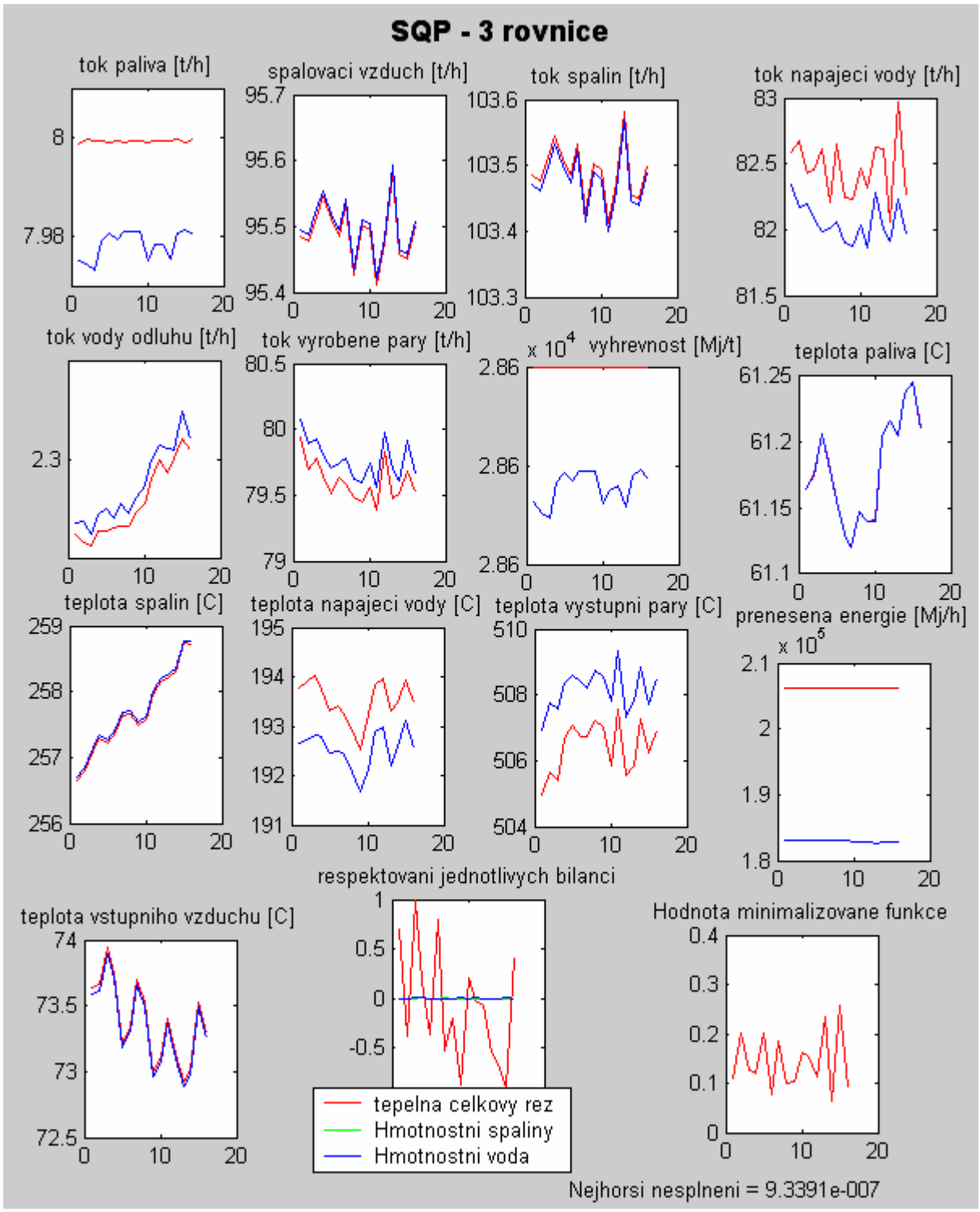
mezi použitím metody projekce gradientu a SQP. Doba, kterou metody potřebují pro řešení je závislá na množství nelineárních rovnic.
Z ohledu splnění lineárních bilančních rovnic je výhodnější metoda projekce gradientu. Jak je z principu metody patrné (kap. 3.4), jsou všechny lineární bilanční rovnice splněny v každém kroku. Pro porušení bilineární bilance je možné zvolit horní odhad porušení, jako ukončovací podmínku.
Oproti tomu metoda SQP nemusí lineární (hmotnostní) bilance ve výsledku vůbec splnit, protože ukončovací podmínka pro velikost porušení omezení platí pro všechna omezení shodně. Důležité je však zdůraznit, že pro praktické využití, není porušení bilance v řádu 10^{-6} fyzikálně významné a neprojeví se ve výpočtu účinnosti zařízení.

7. Závěr

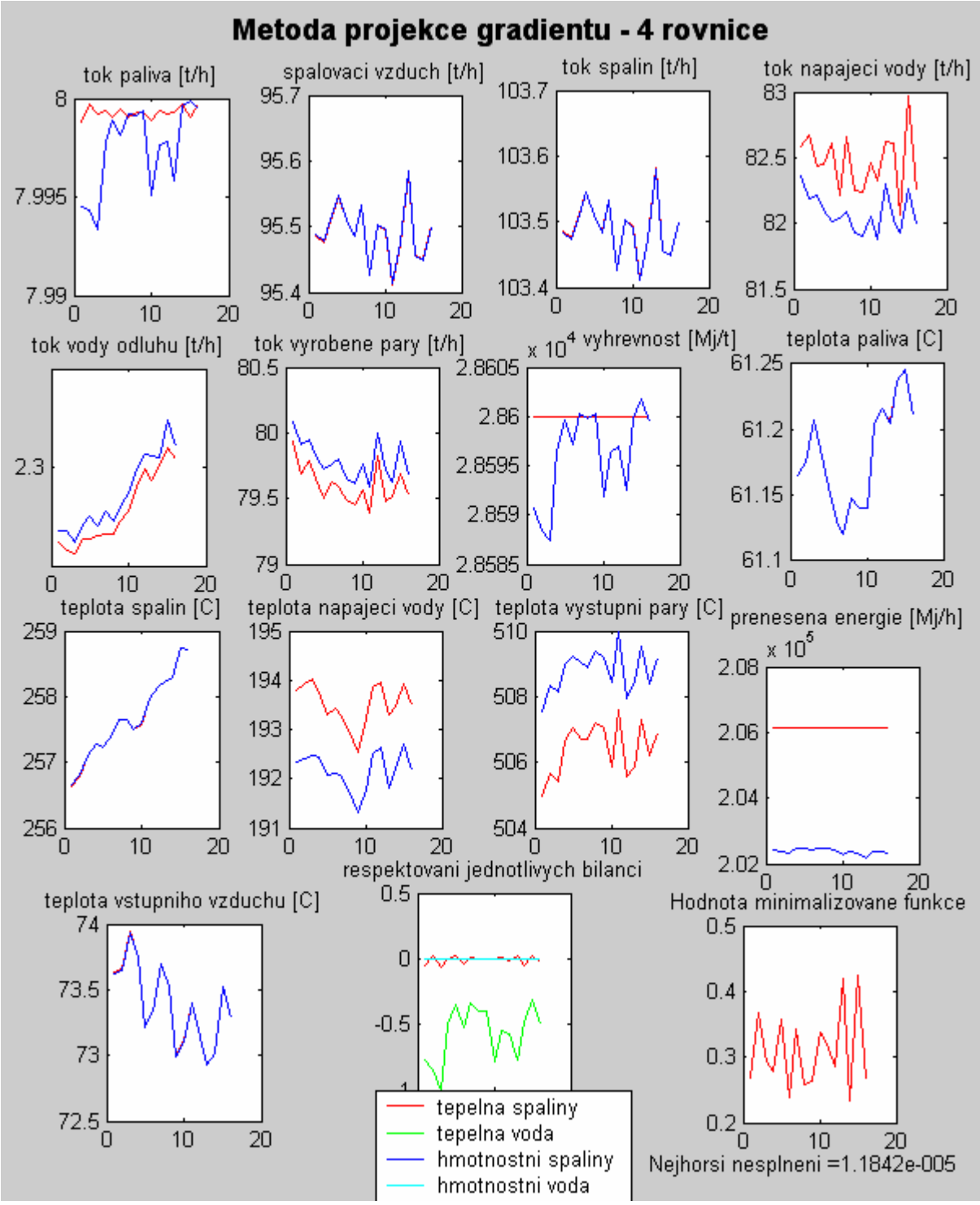
Na základě rešerše literatury jsme formulovali problém nelineárního sladění dat v případě tepelných systémů jako problém minimalizace funkce za bilineárních omezení. Přímé analytické řešení tohoto problému není známo a pravděpodobně neexistuje. Na základě doporučení uváděných v odborných pramenech jsme z možných variant řešení této úlohy vybrali standardně používanou metodu sekvenčního kvadratického programování a modifikovanou metodu projekce gradientu.
Formulovali jsme metodiku *data reconsiliation* na data získaná z určitého parního generátoru a metody jsme aplikovali na data z reálného parního generátoru. Obě metody jsme testovali, v programovacím prostředí Matlab a závěry testů, které jsme realizovali, jsou uvedeny v kapitole 6.
Výsledky diplomové práce je možné dále rozšiřovat. Jednak je možné ze statických případů přejít na případy bilancí v dynamických systémech, kde dochází k akumulaci hmoty a energie a dále je možné rozšiřovat práci směrem k problematice detekce hrubých chyb.



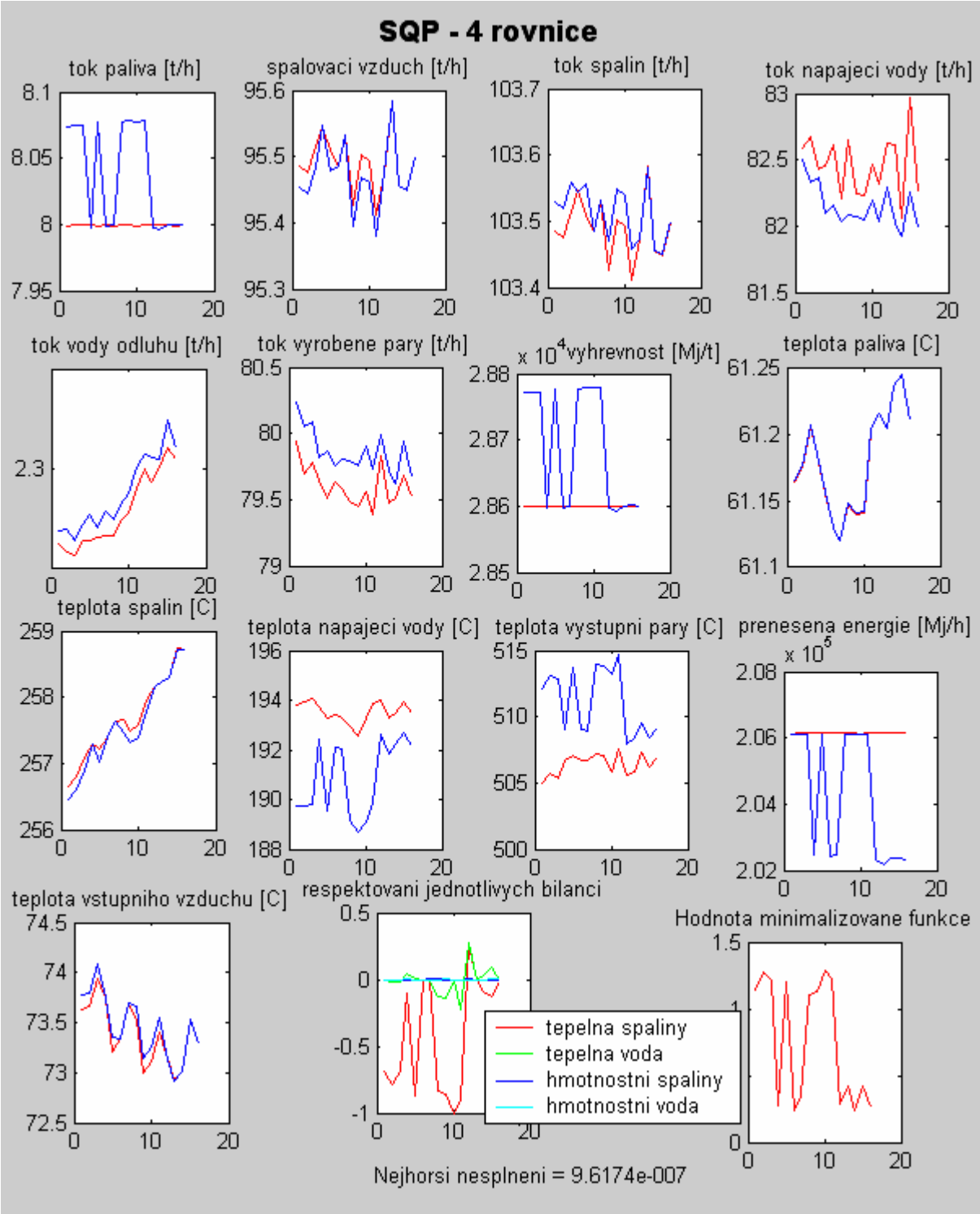
Obr. 6.3.1 Výsledky metody projekce gradientu při použití tří rovnic



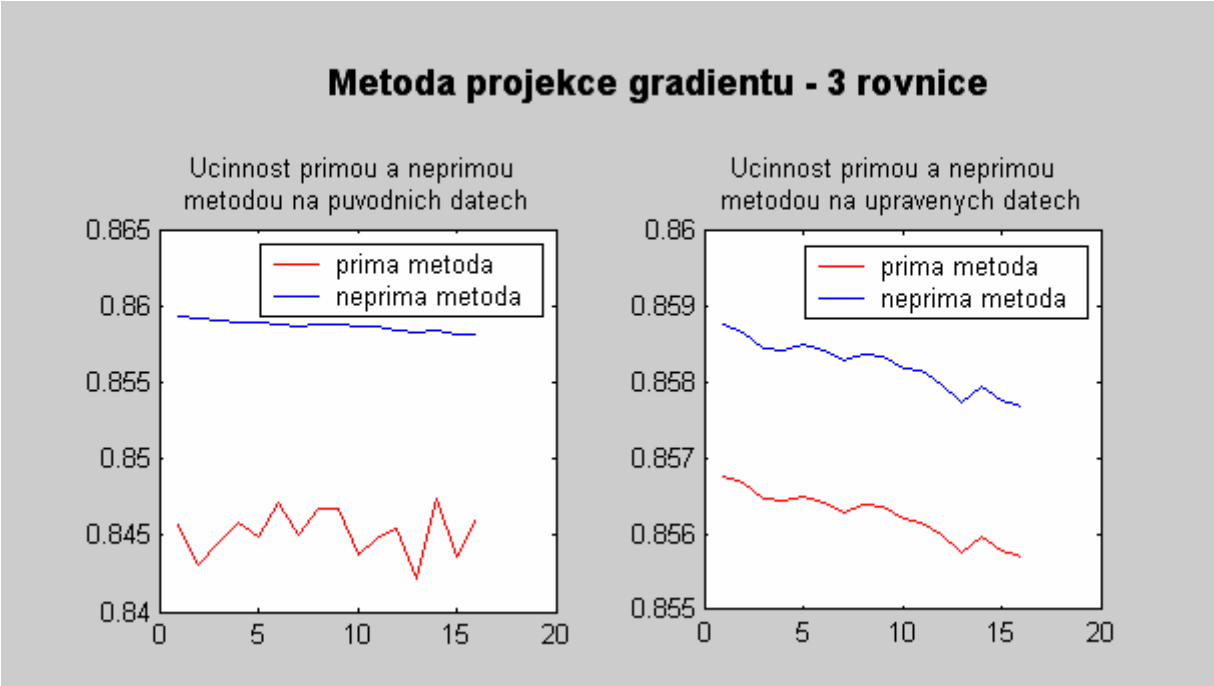
Obr. 6.3.2 Výsledky metody SQP při použití tří rovnic



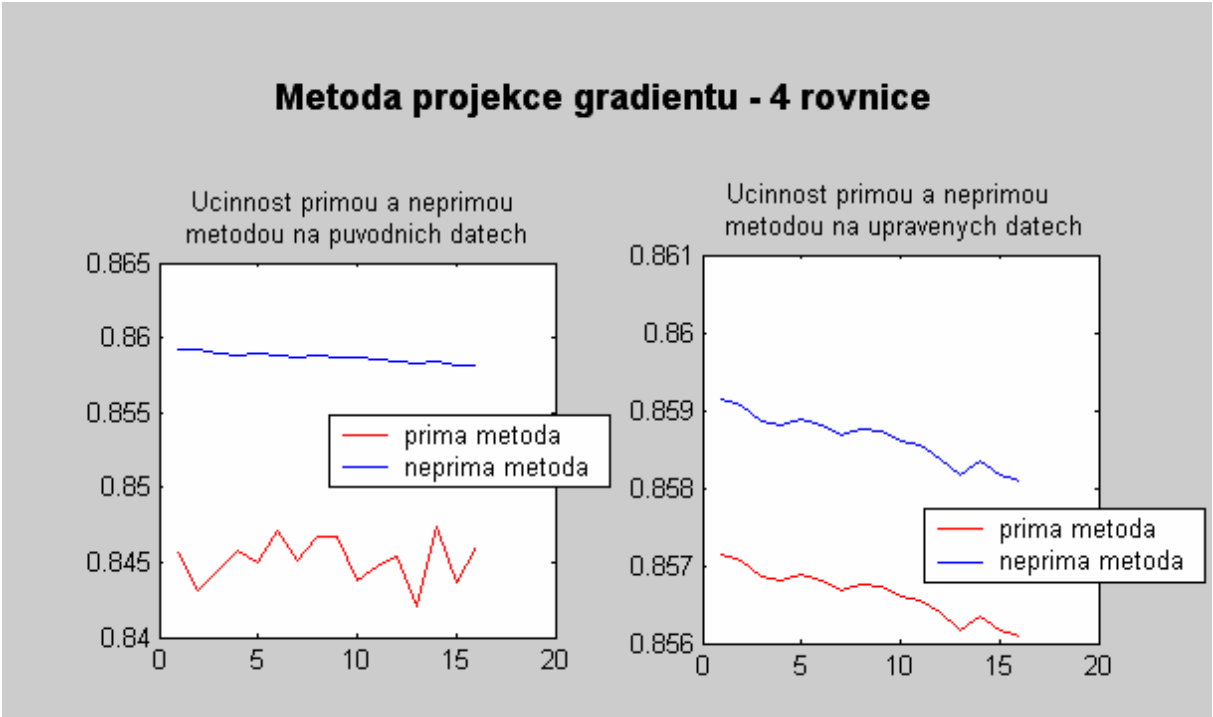
Obr. 6.3.3 Výsledky metody projekce gradientu při použití čtyř rovnic



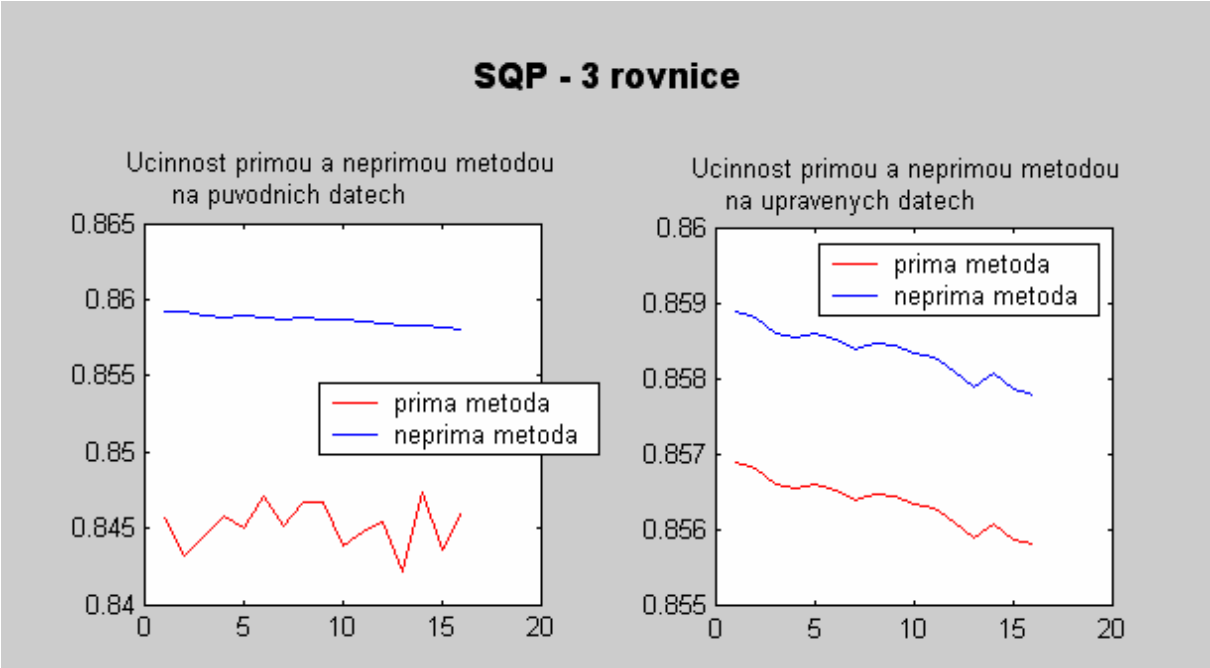
Obr. 6.3.4 Výsledky metody SQP při použití čtyř rovnic



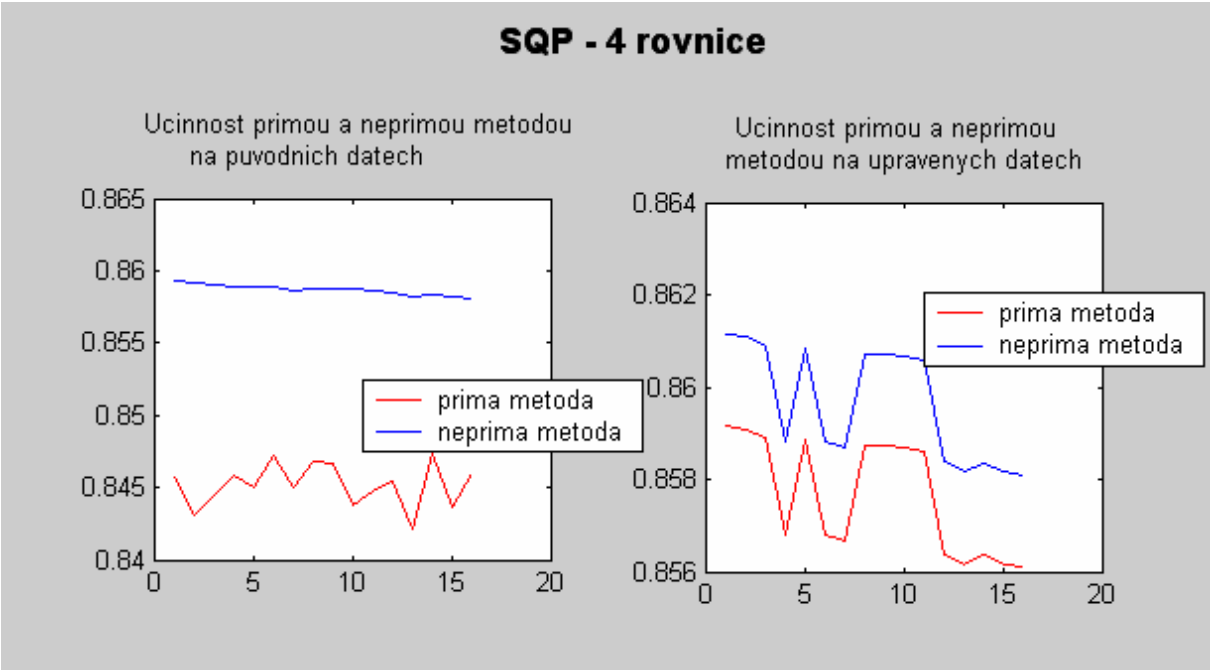
Obr. 6.3.5 Výsledky účinnosti parního generátoru po použití metody projekce gradientu za použití tří rovnic



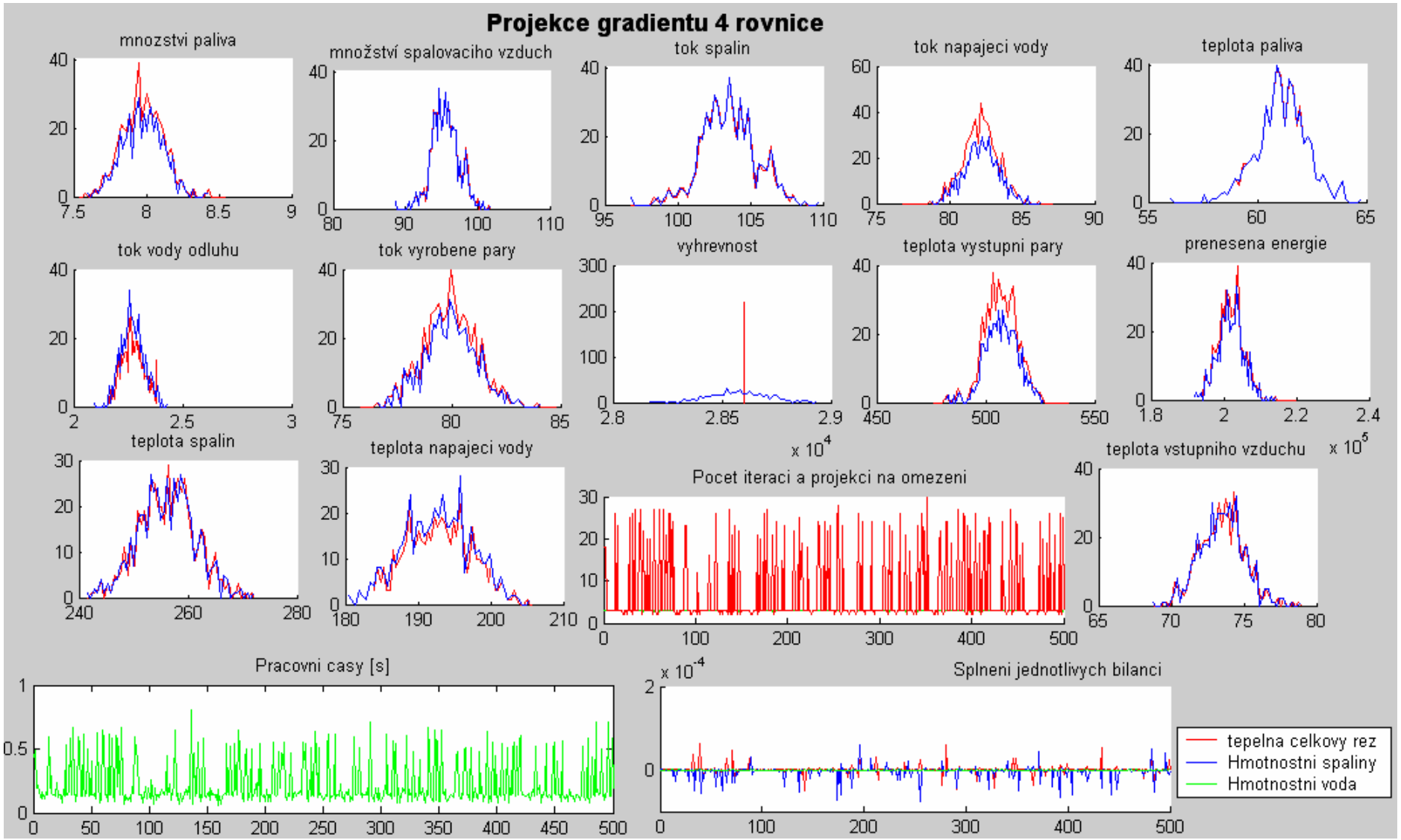
Obr. 6.3.6 Výsledky účinnosti parního generátoru po použití metody projekce gradientu za použití čtyř rovnic

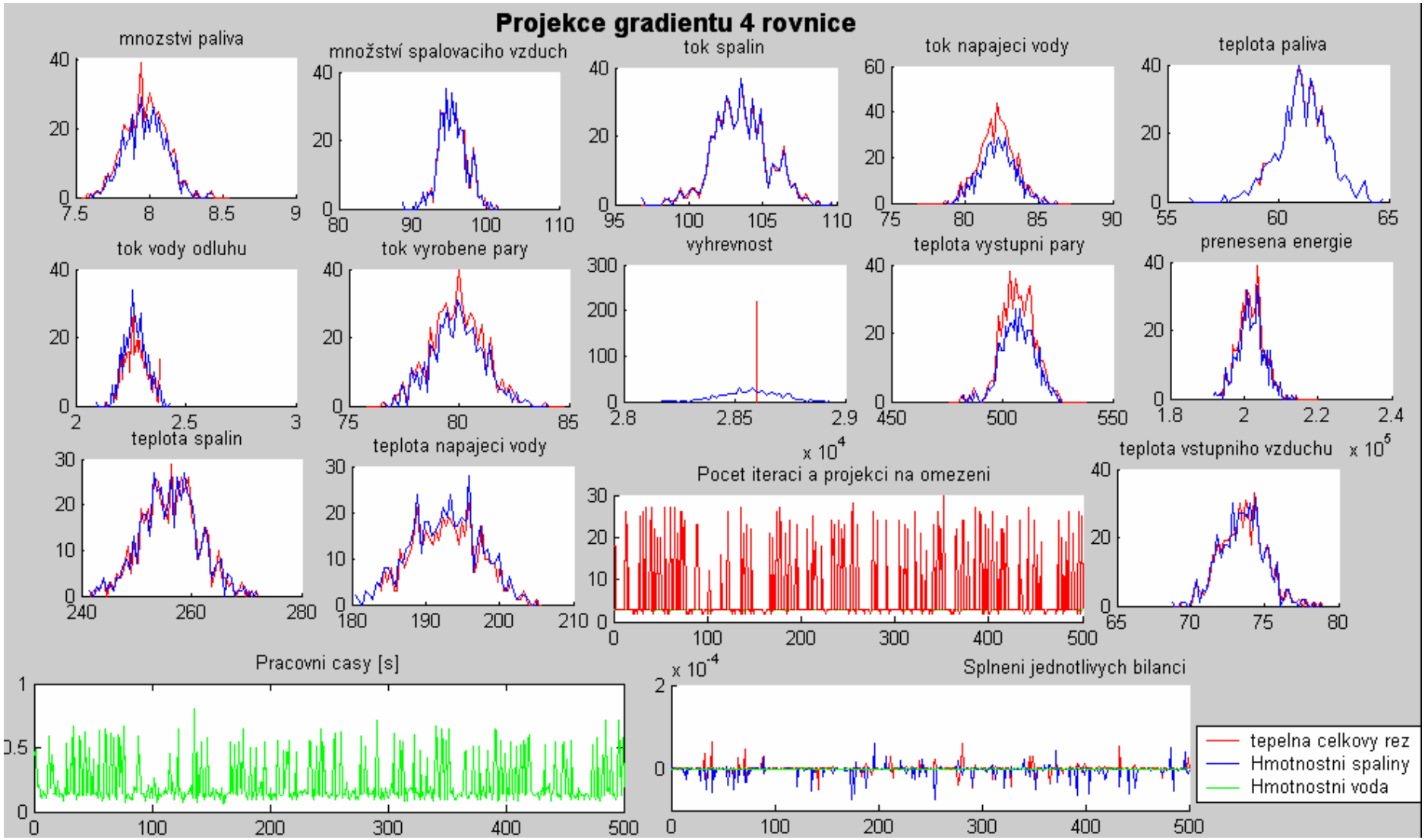


Obr. 6.3.7 Výsledky účinnosti parního generátoru po použití metody SQP za použití tří rovnic

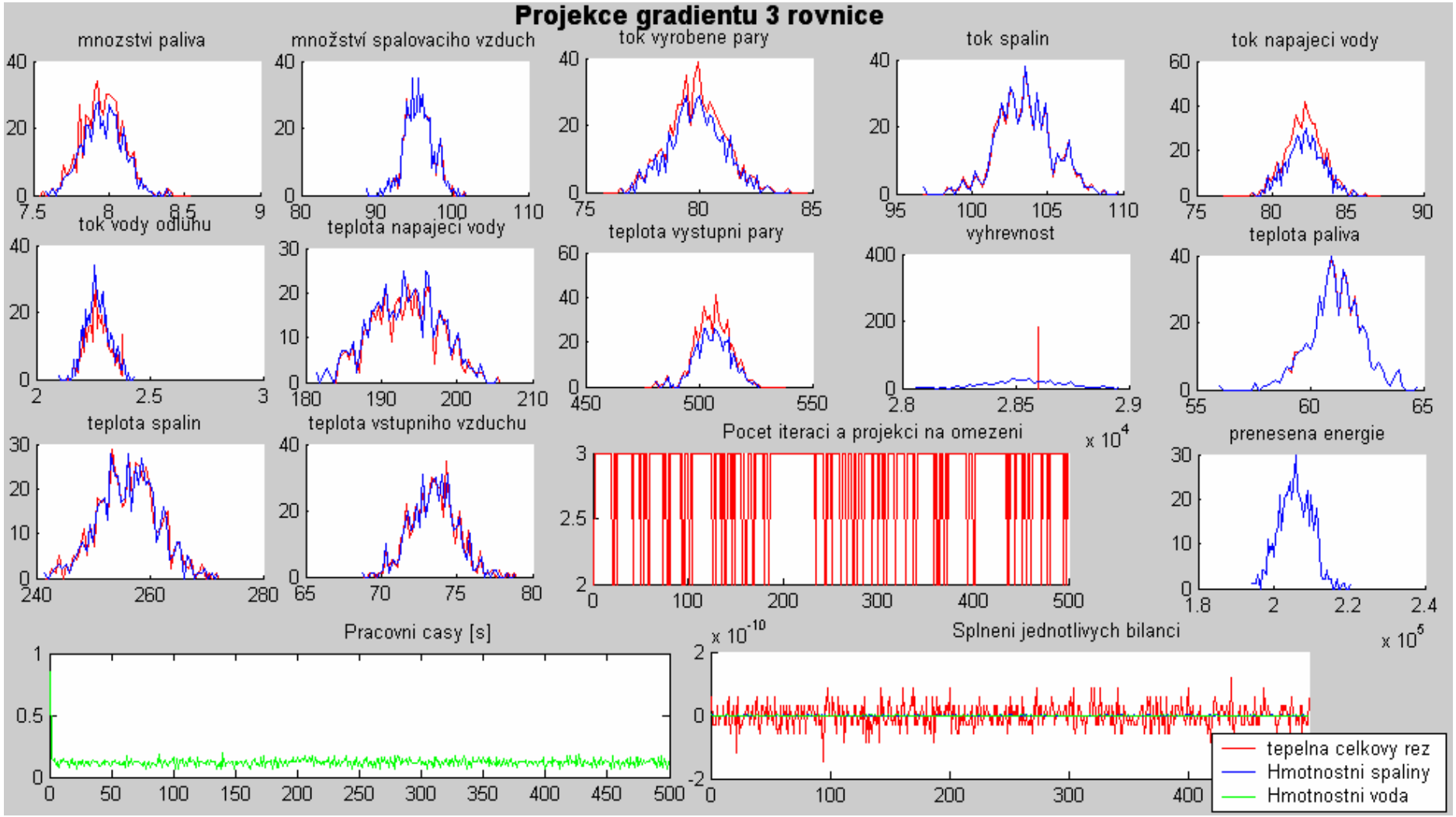


Obr. 6.3.8 Výsledky účinnosti parního generátoru po použití metody SQP za použití čtyř rovnic

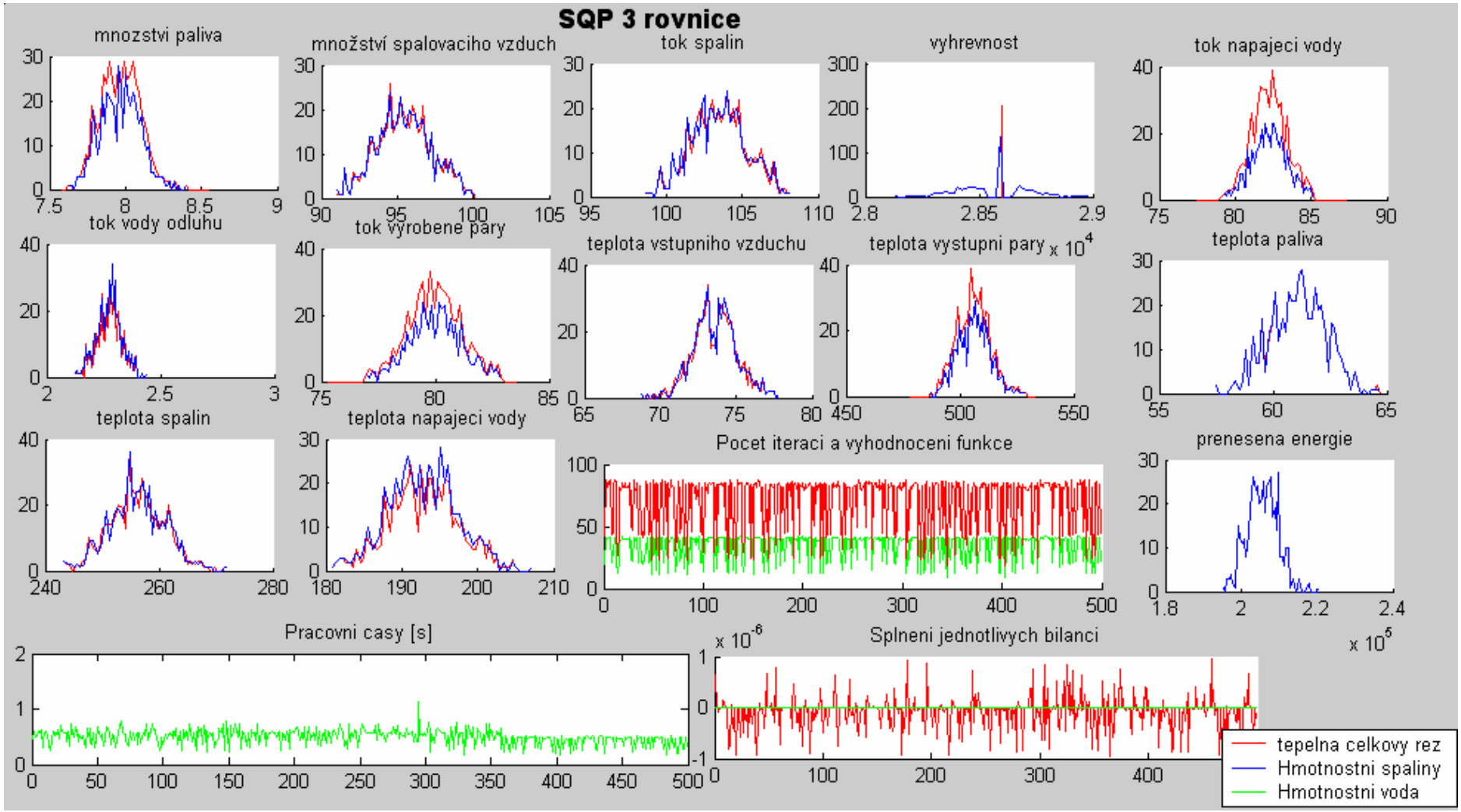

Projekce gradientu 4 rovnice
mnozstvi paliva
množství spalovaciho vzduch
tok spalin
tok napajeci vody
teplota paliva
tok vody odluhu
tok vyrobene pary
vyhrevnost
teplota vystupni pary
prenesena energie
teplota spalin
teplota napajeci vody
x 10^4
Pocet iteraci a projekci na omezeni
teplota vstupniho vzduchu
x 10^5
Pracovni casy [s]
x 10^-4
Splneni jednotlivych bilanci
tepelna celkovy rez
Hmotnostni spaliny
Hmotnostni voda



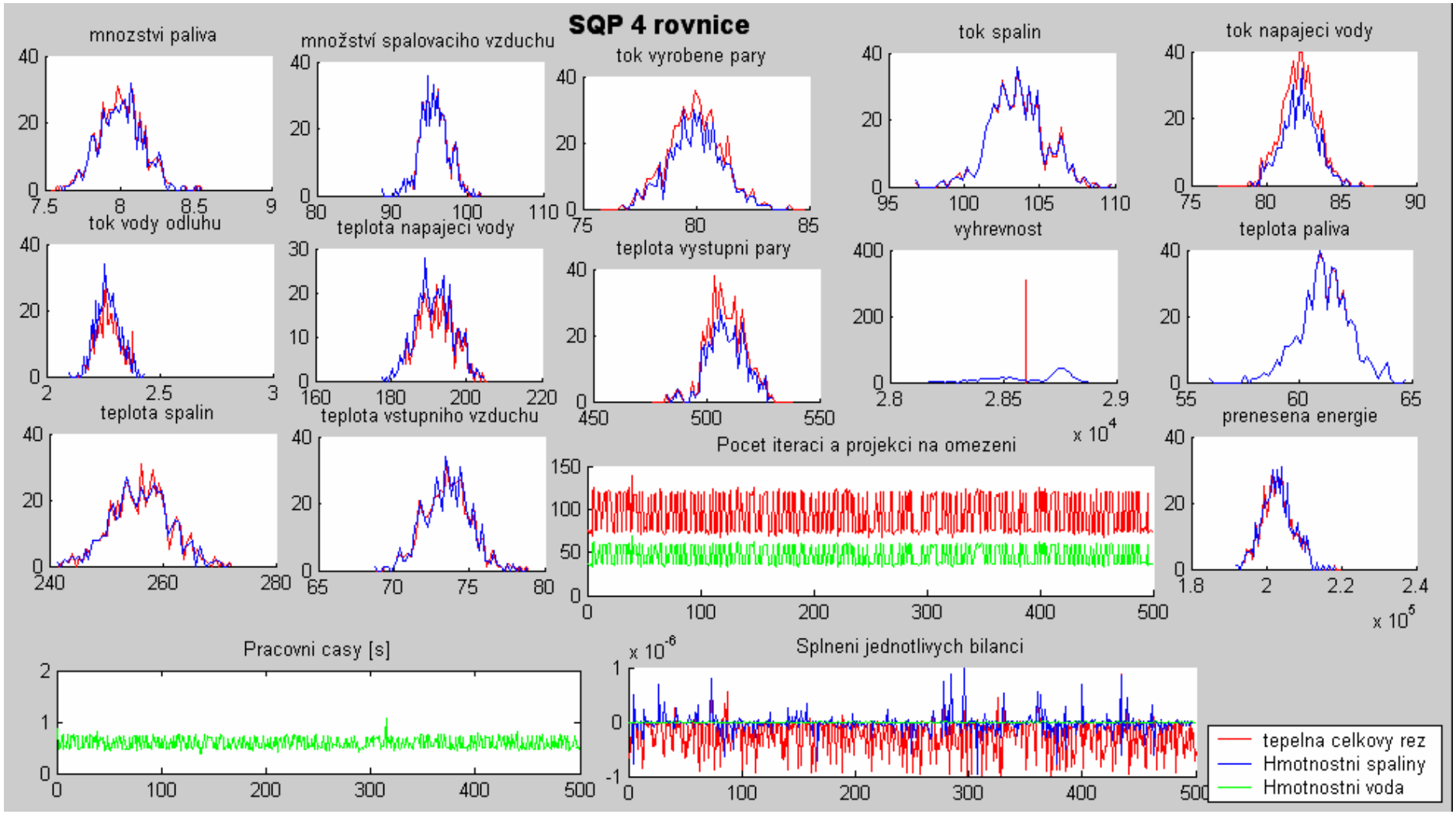
Obr. 6.3.9 Testování metody projekce gradientu při použití čtyř bilančních rovnic na množině různých počátečních podmínek



Obr. 6.3.10 Testování metody projekce gradientu při použití tří bilančních rovnic na množině různých počátečních podmínek



Obr. 6.3.11 Testování metody SQP při použití tří bilančních rovnic na množině různých počátečních podmínek



Obr. 6.3.12 Testování metody SQP při použití čtyř bilančních rovnic na množině různých počátečních podmínek

SEZNAM ODBORNÉ LITERATURY

[1] Madron, F., *Measurement and Data Processing for Optimization and Retrofits,* London: EllisHorwood Limited, 1992.

[2] Veverka, V., *Balancing and Data Reconciliation Minibook equations* [online]. 30.1.1997, 20.6.2003,<*Http://www.chemplant.cz*>.

[3] Veverka, V., Madron, F., *Material and Energy Balancing in the Process Industries. From Microscopic Balances to Large Plants,* Amsterdam: Elsevier, 1997.

[4] Narasimhan, S. - Jordache, C., *Data Reconciliation &Gross Error Detection*, Houston: Gulf Publishing Company, 2000.

[5] *Matlab Onlin HelpDes* [online]. 20.10.2003, <*Http://www.mathworks.com/optim.shtml* >.

[6] Madron, F., Stoichiometry of industrial electrolysis of natrium chloride (in Czech), *Chemický průmysl,* 1981, vol. ***31**: 114-117.*

[7] Crowe, C. M. Observability and redundancy of process data for steady state reconsiliation, *Chemi. Eng. Sci.,* 1989, vol. ***44**: 2909-2917,* 1989.

[8] Vincent, T.L., Grantham, W.J. *Optimality in parametric systems*, John Winley & Sons, Inc., 1981. ISBN 0-471-08307-7

[9] Štecha, J. *Optimální rozhodování a řízení*, Praha: ČVUT, 2002. ISBN 80-01-02083-5.

[10] Crowe, C. M., Campos, Y.A.G., Hrymak, A., Reconsiliation of Process Flow Mates by Matrix Projection. I: Linear Case, 1983 *AIChE Journal 29: 881-888.*

[11] Černý, V., Hrdlička, L., Janeba, B., Karták, J., Pikman, M., *Parní kotle a spalovací zařízení,* Praha: SNTL, 1975.

[12] Fialová, M., Šafařík, P., *Základy termomechaniky vlhkého vzduchu*, Praha: ČVUT, 2002. ISBN 80-01-01977-2.

[13] Krajník, E., *Maticový počet*, Praha: ČVUT, 2000.ISBN 80-01-01723-0.

[14] Dlouhý, T., *Návrhy kotlů a spalinových výměníků*, Praha: ČVUT, 1999.

[15] Scheisser, V. E., *Nonlinear equations* [online]. 30.1.2000, 5.1.2004, <*Http://www.lehigh.edu/~wesl/apci/24feb00/b.ps* >.

[16] Biggs, M.C., Constrained Minimization Using Recursive Quadratic Programming, *Towards Global Optimization* . Dixon, L.C.W., Szergo, G.P. (eds.), North-Holland, 1975. s. 341-349.

[17] Luenberger, D. C., *Linear and nonlinear programming*, Addison-Wesley Publishing Copany, 1984. ISBN 0-201-15794-2.

[18] Rektorys, K., *Přehled užité matematiky*, Praha: Prométheus, 1995.

[19] Vytásek, E., *Numerické metody*, Praha: SNTL, 1987.