

ZACHODNIOPOMORSKI UNIWERSYTET TECHNOLOGICZNY
W SZCZECINIE
WYDZIAŁ INFORMATYKI

Rozprawa doktorska

Paweł Krutys

***Algorytm adaptacyjnej estymacji wektora stanu
z niemierzonymi współrzędnymi
dla obiektów o strukturze szeregowej
(wersja poprawiona)***

Promotor

dr hab. inż. Tadeusz Kwater, prof. UR

Szczecin 2016

WEST POMERANIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY
SZCZECIN

FACULTY OF COMPUTER SCIENCE AND INFORMATION
TECHNOLOGY

Doctoral thesis

Paweł Krutys

***The algorithm for adaptive estimation of the state vector
with no-measurements of coordinates
for objects with a serial structure***

Supervisor

PhD Eng. Tadeusz Kwater, prof. UR

Szczecin 2016

*Pracę tę dedykuję Basi, Tymusiowi,
Kubusiowi i Rodzicom*

W szczególności chciałbym podziękować:

- *Mojemu Promotorowi Panu **dr hab. inż. Tadeuszowi Kwaterowi, prof. UR** za życzliwość, wszechstronną pomoc oraz cenne wskazówki, które ukierunkowały moją pracę naukową,*
- *Mojej rodzinie i przyjaciołom, którzy wspierali mnie przez cały ten okres,*
- *Panom dr inż. Bogusławowi Twarogowi i dr Robertowi Pękali oraz całemu zespołowi z Katedry Inżynierii Komputerowej, za wspólną pracę i pomoc.*

SPIS TREŚCI

1. Wprowadzenie	str. 7
1.1 Cel i teza pracy	str. 8
1.2 Przegląd aktualnej wiedzy i literatury	str. 9
1.3 Struktura pracy	str. 12
2. Metody numeryczne w zagadnieniach modelowania matematycznego	str. 15
2.1 Wybrane metody numeryczne	str. 16
2.1.1 Metoda różnic skończonych	str. 17
2.1.2 Metoda Eulera	str. 18
2.1.3 Metoda Rungego - Kuty	str. 20
3. Modele matematyczne obiektu o strukturze szeregowej	str. 22
3.1 Składniki i własności wód powierzchniowych	str. 22
3.2 Metody pomiaru wybranych wskaźników jakości wody	str. 26
3.3 Matematyczne modele biochemicznie zanieczyszczonej rzeki	str. 33
3.3.1 Modele o parametrach rozłożonych	str. 46
3.3.2 Równania różniczkowe zwyczajne „wzdłuż charakterystyk”	str. 53
3.4 Analityczne rozwiązanie równań różniczkowych zwyczajnych dla zanieczyszczonej wody w rzece	str. 54
3.5 Dyskretnie rozwiązanie równań różniczkowych modelu	str. 57
4. Estymacja stanu obiektu filtrem Kalmana	str. 61
4.1 Model Gaussa-Markowa – kryteria estymacji	str. 62
4.2 Estymacja stanu obiektu filtrem Kalmana z niemierzonymi współrzędnymi wektora stanu	str. 65
4.3 Badania symulacyjne estymacji stanu filtrem Kalmana	str. 70

5. Projekt adaptacyjnego algorytmu estymacji stanu obiektu szeregowego	str. 82
5.1 Paradygmaty algorytmów	str. 83
5.2 Idea algorytmu adaptacyjnego wzmocnienia filtra generującego estymatę stanu	str. 88
5.3 Badania symulacyjne algorytmu dla różnych konfiguracji parametrów	str. 93
5.3.1 Warunki początkowe estymat i współczynnika wzmocnienia filtra	str. 93
5.3.2 Zmiana współczynnika ostrożności filtra	str. 96
5.3.3 Warianty modyfikacji wzmocnienia filtra adaptacyjnego	str. 98
5.4 Walidacja działania algorytmu adaptacyjnego	str. 100
6. Rozszerzony adaptacyjny algorytm estymacji stanu	str. 103
6.1 Innowacja algorytmu adaptacyjnego z zadaniem horyzontem obserwacji	str. 103
6.2 Badania symulacyjne algorytmu z określonym oknem czasowym	str. 110
6.3 Porównanie badań estymacji adaptacyjnej	str. 119
7. Wnioski końcowe i podsumowanie.....	str. 125
8. Bibliografia	str. 128

1. Wprowadzenie

Jednym z głównych problemów przetwarzania sygnałów jest zagadnienie estymacji polegające na odtworzeniu użytecznego sygnału na podstawie innego sygnału obarczonego niepożądanym zakłóceniem. Zastosowanie klasycznej filtracji do eliminacji zakłóceń może spowodować usunięcie części sygnału użytkowego, dlatego stosuje się filtry optymalne, wykorzystujące statystyczne właściwości sygnałów. Do takich filtrów należy filtr Kalmana rekurencyjnie wyznaczający minimalno-wariancyjną estymatę wektora stanu modelu liniowego układu dynamicznego na podstawie pomiarów wyjścia tego układu. Przyjmuje się założenie, że zarówno pomiar jak i proces przetwarzania wewnątrz układu jest obciążony błędem o rozkładzie gaussowskim.

Taki przypadek rozważań dotyczy zagadnień estymacji dla układów stochastycznych. Głównym aspektem badań w filtrze Kalmana jest równanie różniczkowe estymaty stanu, w którym występuje współczynnik wzmocnienia zależny od macierzy kowariancji błędu estymacji. Wartość tego współczynnika wyznacza się z nieliniowego równania różniczkowego Riccatiego, uwarunkowanego od charakterystyk sygnałów oddziałujących na badany obiekt i pomiar. Zatem przebieg wektora estymaty stanu zależy od dokładności określenia sygnałów stochastycznych.

W ogólności filtr Kalmana generuje zadawalające rezultaty estymacji stanu pod warunkiem, że charakterystyki sygnałów wymuszających są poprawnie określone. Dla niektórych przypadków sygnałów wyznaczenie ich charakterystyk losowych jest zadaniem trudnym, np. przy określeniu wpływu zjawisk atmosferycznych, jako wymuszeń na stan zbiorników wodnych. Inne podejścia do zagadnień estymacji nie wymagają konieczności charakteryzowania sygnałów losowych. Można tutaj wskazać cieszące się powodzeniem metody adaptacyjne. W pracy zaproponowano algorytm adaptacyjny estymacji stanu o strukturze jak w filtrze Kalmana, przy czym jego współczynnik wzmocnienia jest obliczany dla każdej chwili czasowej. Dzięki temu zmienna wartość współczynnika wzmocnienia filtru jest rodzajem odpowiedzi na zmianę charakterystyk sygnałów losowych. Prawidłowe wartości wzmocnień filtru powinny być takie, aby nie destabilizować rozwiązania całościowe, a ich zmiany to rodzaj „przybliżania się” do optymalnych rozwiązań filtru Kalmana. W pracy zaproponowano rozwiązanie, w którym wprowadza się oryginalny mechanizm wyznaczania współczynnika wzmocnienia filtru w procesie estymacji stanu obiektu, którego właściwości wskazują na szeregowość.

1.1 Cel i teza pracy

Najważniejszym wyzwaniem i jednocześnie wiodącym elementem badawczym było opracowanie nowego podejścia algorytmicznego procesu adaptacji, w którym możliwe byłoby pominięcie konieczności określenia charakterystyki sygnałów wymuszających. Jak już wcześniej wspomniano, w pewnych przypadkach takie określenie może być niezwykle trudne, dlatego w podjętych badaniach postawiony został cel, który należy sformułować w następujący sposób:

Cel pracy:

- **Opracowanie algorytmu adaptacyjnej zmiany współczynnika wzmocnienia filtru do estymacji wektora stanu z niektórymi niemierzonymi współrzędnymi dla obiektów o strukturze szeregowej.**

Zastosowanie proponowanego algorytmu adaptacyjnego do wyznaczenia wartości współczynnika wzmocnienia filtru pozwala ominąć niedogodności wynikające z konieczności oszacowania charakterystyk sygnałów oddziałujących na rozważany obiekt.

Wykonując tak postawione zadanie zrealizowano następujące cele cząstkowe:

- sformułowano modele matematyczne obiektu opisanego równaniami różniczkowymi zwyczajnymi lub cząstkowymi dla potrzeb weryfikacji algorytmu,
- dokonano doboru metod numerycznych oraz przeprowadzenie odpowiednich badań symulacyjnych,
- przeprowadzono badania symulacyjne estymacji z wykorzystaniem filtru Kalmana,
- zaproponowano algorytm adaptacyjny doboru współczynnika wzmocnienia filtru,
- rozszerzono adaptacyjny algorytm o zadany horyzont obserwacji,
- wykonano szereg badań uwzględniając zmienność parametrów i warunków pracy mechanizmu adaptacji.

Podejmując powyższe cele i zadania badawcze, w ramach niniejszej pracy starano się wykazać prawdziwość następującej tezy:

Teza pracy:

Stosując zaproponowany algorytm adaptacyjny wyznaczania zmian wartości współczynnika wzmocnienia filtru można realizować estymację stanu z niemierzonymi współrzędnymi dla wybranej klasy obiektów z efektywnością porównywalną lub lepszą niż w przypadku metod klasycznych. Czas realizacji i złożoność obliczeniowa będą korzystniejsze od standardowego rozwiązania filtru Kalmana.

Na podstawie zaproponowanego podejścia mogą być realizowane rzeczywiste systemy do estymacji stanu. Jest to niezwykle istotne dla potrzeb sterowania zwłaszcza takimi obiektami, w których pomiary niektórych współrzędnych wektora stanu wymagają obsługi laboratoryjnej. Obecnie dostępne środki techniczne i metody pozwalają wykonać zadanie adaptacyjne w krótkim czasie i przy nieznanymi charakterystykach zakłóceń. Zaprezentowane w pracy podejście można zakwalifikować do tej kategorii zadań. Autorski algorytm adaptacyjny, jaki proponuje się w niniejszej rozprawie daje możliwość uzyskania poprawnej estymacji stanu obiektu funkcjonującego w warunkach o nieznanymi charakterystykach sygnałów stochastycznych.

1.2 Przegląd aktualnej wiedzy i literatury

Współczesne badania inżynierskie i badania systemowe ukierunkowane na zagadnienia konstrukcji nowych algorytmów zmieniają w obecnym czasie swój kierunek. Przede wszystkim w badaniach tych zmienił się charakter zadań badawczych związany z ich metodyką oraz sposobem rozwiązywania przy wykorzystaniu wszechobecnej techniki komputerowej. W poprzedniej dekadzie w badaniach naukowych dominowały różnorodne zagadnienia często pokrewne optymalizacji i badaniom operacyjnym, ściśle sformalizowane najczęściej w ujęciu deterministycznym, z dodatkiem elementów probabilistyki. Stanowiły one tzw. „zadania twarde”, w których uwarunkowania problemu, w tym cel działań, modele i ograniczenia, były dokładnie określone i zdeterminowane. Typowe w tej sytuacji postępowanie polegało na znalezieniu najlepszego rozwiązania, albo opracowania wariantów wspomagających dalszy proces decyzyjny. Metodyka rozwiązywania tego typu zagadnień polegała raczej na wyszukaniu i użyciu

odpowiedniego aparatu matematycznego oraz stosowanej identyfikacji postaci modelu wraz z jego deterministycznymi parametrami. Tymczasem zarówno współczesny wzrost wymagań formułowanych wobec badań, jak i rozwój dostępnych metod, a nawet powstawanie nowatorskich koncepcji spowodowały, że obecnie dominują tzw. „zadania miękkie”, których istotę stanowią: metody probabilistyczne, zbiory przybliżone, zmienne niepewne, logika rozmyta, sieci neuronowe i algorytmy adaptacyjne. Zapewniają one wysoce zróżnicowany aparat formalny, zwłaszcza, że w/w metody mogą być łączone [23].

Analizując pokrewną tematykę spotykaną w literaturze dokonano przeglądu badań związanych z rozwiązywaniem i realizacją problematyki prezentowanej w niniejszej dysertacji.

Metodyka rozwiązywania zadań systemowych wyraźnie zmieniła swój charakter z analitycznych metod matematycznych na procedury związane z wykorzystaniem najnowszych technik komputerowych i metod numerycznych. Należy jednak podkreślić, że istotą rzeczy nie jest tu rozwój w zakresie tradycyjnych metod numerycznych wspomagających klasyczne problemy matematyczne, lecz przede wszystkim rozwój specjalistycznych algorytmów, czyli technik komputerowych, dzięki którym procesy automatyzacji pomiarów oraz globalizacji systemów informatycznych są efektywniejsze. Zmiany paradygmatu badań naukowych, zwłaszcza w modelowaniu zjawisk o globalnym znaczeniu są uzasadnione szybkim rozwojem nowych technik komputerowych wykorzystujących informację rozpowszechnioną w sieciach oraz sposobem selekcji i doboru danych [27].

Zagadnienia rozważane w [20] wskazują, iż w ciągu ostatnich lat, filtry cząsteczkowe były stosowane z wielkim powodzeniem w problemach estymacji stanu. Metodę, jaką proponuje się w celu wyznaczania błędu aproksymacji nazwano metodą KLD (Kullback-Leibler Distance). Jej kluczową ideą jest określony błąd aproksymacji wyznaczony na podstawie filtru cząsteczkowego. Zaprezentowane tam statystyczne podejście do zwiększenia skuteczności filtrów cząsteczkowych poprzez dostosowanie wielkości zestawów próbek w procesie wyznaczania błędu obarczone jest jednak dodatkowymi wymaganiami w postaci mocy obliczeniowej.

Zbliżoną tematykę przedstawia się w [30], w pracy tej obliczenia adaptacyjne i odpowiednie techniki są stosowane do analizy sekwencji obrazów cyfrowych, nie mniej jednak problem dotyczył adaptacji dynamicznych sekwencji oraz odpowiednio zaprojektowanych algorytmów, gdzie rozwiązanie bazuje na ANN-learningu. Takie rodzaje biologicznie uzasadnionych metod mogą być zastosowane, jako obliczeniowy

odpowiednik i mechanizm percepcji wzrokowej. Implementacja tego typu algorytmu jest zaliczana do kategorii adaptacyjnego rozpoznawania obiektów. Realizacja takiego podejścia wymaga jednak konieczności przeprowadzenia procesu uczenia, co wiąże się z preprocesingiem danych uczących.

Istnieje wiele podejść związanych z zastosowaniem mechanizmu adaptacyjnego w procesach estymacji stanu obiektu zaprezentowanych między innymi w [11], [16], [22].

Zaproponowane w pracy podejście autorskie algorytmu zostało weryfikowane na podstawie badań symulacyjnych, a realizację tego wykonano w oparciu o ideę modelowania matematycznego z wykorzystaniem metod numerycznych oraz maszyny cyfrowej. Zaprojektowany algorytm ukierunkowany jest na obiekty o strukturze szeregowej, do których można zaliczyć różnego rodzaju wymienniki ciepła, piece przepychowe, reaktory chemiczne pracujące w układzie szeregowym, czy rzeki zanieczyszczone.

W szczególności w pracy do rozważań przyjęto model biochemicznie zanieczyszczonej rzeki. Zagadnienia modelowania matematycznego zjawisk zanieczyszczonej rzeki podjęto w wielu opracowaniach [3], [12], [13], [55], [62]. Ze względu na złożoność zjawisk opisywane modele posiadają różną strukturę i komplikację. W pracy [45], zaprezentowano numeryczne modelowanie przepływów nieustalonych w sieci koryt otwartych. Dotyczy to w szczególności dobrze znanych i wykorzystywanych w praktyce inżynierskiej jednowymiarowych modeli numerycznych bazujących na układzie równań de Saint Venanta. Coraz częściej stosowane są także dwuwymiarowe równania płytkiej wody [62]. Rozwój metod numerycznych i mocy obliczeniowych współczesnych komputerów sprawił, że algorytmy rozwiązywania równań transformacji przepływu stały się powszechnie dostępne i nie istnieje już bariera czasu realizacji obliczeń oraz ilości danych niezbędnych do uzyskania poprawnego rozwiązania. Stąd też przy próbie modelowania odcinka rzeki należy przede wszystkim podjąć decyzję o wyborze równań transformacji i algorytmów ich rozwiązania.

Istotnym czynnikiem jest możliwość pozyskania oprogramowania implementującego algorytmy rozwiązywania równań transformacji przepływu. Ze względu na kryterium odtworzenia w modelu zmienności przestrzennej stanu układu i parametrów obiektu modele dzieli się na dwie grupy [55].

- modele o parametrach skupionych,
- modele o parametrach rozłożonych.

Pierwsza grupa modeli posługuje się pojedynczymi wartościami liczbowymi wyrażającymi skumulowane parametry obiektu. Natomiast modele o parametrach

rozłożonych cechują się przestrzenną zmiennością parametrów i odwzorowują taką samą zmienność modelowanego obiektu [45].

Podobne podejście jest prezentowane w [7], gdzie model budowany jest w oparciu o zagadnienie różnic skończonych w metodzie niejawnej na podstawie trójwymiarowych płytkich równań wody i zmodyfikowany do wykorzystania niestrukturalnych siatek. Tak otrzymany rezultat posiada wiele zalet, lecz pojawiają się problemy o skomplikowanej geometrii. Otrzymane modele są stosunkowo proste, oparte na bilansie masowym. Praktyczne metody numeryczne do rozwiązywania dwuwymiarowych równania wody zostały sformułowane przy użyciu skończonej różnicy dyskretyzacji przestrzennej.

W pracy stosowano model matematyczny biochemicznie zanieczyszczonej rzeki opisany równaniami różniczkowymi typu hiperbolicznego z podziałem na odcinki. Dla tak przyjętego modelu dokonano transformacji polegającej na zamianie równań różniczkowych cząstkowych na zbiór równań różniczkowych zwyczajnych na tzw. charakterystykach związanych z prędkością przepływu. Taka transformacja nie wpływa na dokładność opisu zjawisk.

Opracowanie obecnej pracy doktorskiej stanowi pewien rodzaj uzupełnienia badanej tematyki i pozycji literaturowych. Przyjęte w badaniach cele i założenia znajdują swoje odzwierciedlenie w strukturze pracy.

1.3 Struktura pracy

Praca zawiera zagadnienia dotyczące adaptacyjnego algorytmu do wyznaczenia współczynnika wzmocnienia filtra do estymacji stanu dla obiektów połączonych szeregowo. Przedstawiono projekt algorytmu oraz jego rozszerzenie, a także wyniki symulacyjne dla modelu obiektu reprezentującego rzekę zanieczyszczoną biochemicznie. W szczególności dla celów testowych rozważano zmieniające się warunki wymuszeń obiektowych i różne parametry algorytmu. Powyższą tematykę przedstawiono w siedmiu rozdziałach. Poszczególne rozdziały zawierają następujące treści:

1. Wprowadzenie. W rozdziale tym przedstawiono tematykę rozprawy, cel i tezę pracy oraz przegląd wybranych pozycji literaturowych związanych z rozważanym zagadnieniem. Opisano zakres pracy i skróconą charakterystykę prowadzonych badań.

- 2. Metody numeryczne w zagadnieniach modelowania matematycznego.** Rozdział ten zawiera krótki opis metod numerycznych, które posłużyły do rozwiązywania modeli matematycznych. Przedstawiono sposoby rozwiązywania złożonych problemów matematycznych za pomocą narzędzi obliczeniowych udostępnianych przez popularne języki programowania. Obecnie metody numeryczne są jedną z tych dziedzin matematyki stosowanej, których zastosowanie w praktyce jest powszechne.
- 3. Modele matematyczne obiektu o strukturze szeregowej.** Rozdział zawiera opis modelu matematycznego zanieczyszczonej biochemicznie rzeki reprezentowany równaniami różniczkowymi cząstkowymi typu hiperbolicznego. Wykorzystując naturę przepływu wody w rzekach dokonano przekształcenia modelu do zbioru charakterystyk danych w postaci równań różniczkowych zwyczajnych. Dla takiego podejścia sformułowano zagadnienie estymacji wskaźników, jakości wody. W rozdziale tym zawarto również opis i analizę zastosowanych metod numerycznych.
- 4. Estymacja stanu obiektu filtrem Kalmana.** W rozdziale tym przedstawiono zagadnienie estymacji stanu rzeki z wykorzystaniem filtru Kalmana. Zaprezentowano kryteria estymacji. Podano kowariancję błędu i równania pozwalające wyznaczyć estymaty stanu obiektu. Wskazano na brak pomiarów współrzędnej wektora stanu w procesie estymacji.
- 5. Projekt adaptacyjnego algorytmu estymacji stanu obiektu szeregowego.** W oparciu o podstawowe paradygmaty algorytmów przedstawiono propozycję algorytmu, który w sposób adaptacyjny wyznacza współczynnik wzmocnienia filtru estymującego stan obiektu. Istota zmian wartości współczynnika wzmocnienia bazuje na uwzględnieniu zdefiniowanej dla potrzeb obliczeniowych aktualnej wielkości błędu estymacji dla mierzonej współrzędnej stanu. Zaprezentowano rezultaty badań symulacyjnych zmian wartości tego współczynnika oraz błędy estymacji uwzględniające wpływ zmian parametrów algorytmu.
- 6. Rozszerzony adaptacyjny algorytm estymacji stanu.** Rozdział zawiera opis kolejnego ulepszenia mechanizmu adaptacyjnego poprzez wyznaczenie korekty wzmocnienia filtru na podstawie kilku poprzednich pomiarów, przy czym obliczenia tej korekty dokonuje się w każdym momencie otrzymania pomiaru. Wskazano, że

przedstawione wyniki badań symulacyjnych dla różnych wartości parametrów charakteryzujących proces adaptacji wykazują się większą poprawnością generowania estymaty stanu w porównaniu z algorytmem uwzględniającym tylko bieżący pomiar.

7. Wnioski końcowe i podsumowanie. Rozdział zawiera rozważania dotyczące zagadnień prawidłowości sformułowanej tezy pracy związanej z adaptacyjnym algorytmem obliczania współczynnika wzmocnienia filtra estymującego stan obiektu.

2. Metody numeryczne w zagadnieniach modelowania matematycznego

Metody numeryczne zajmują się znajdowaniem rozwiązań zadań matematycznych przy użyciu komputerów. W szczególności metody numeryczne stosuje się w przypadkach, kiedy nie istnieje rozwiązanie analityczne zadania lub takie rozwiązanie jest zbyt złożone obliczeniowo. Cechą charakterystyczną jest to, że uzyskujemy rozwiązania przybliżone z założoną, z góry określoną dokładnością.

Metody numeryczne stanowią ważny element wiedzy współczesnego informatyka. Nie sposób sprawnie i skutecznie poruszać się w świecie liczb bez znajomości podstaw tej dziedziny. Nie wszystkie problemy matematyczne, dadzą się, bowiem rozwiązać analitycznie i w takiej sytuacji niezbędna jest znajomość metod obliczeniowych. Wiedza ta jest niezbędna pomimo szybkiego rozwoju informatyki, ponieważ rezultat obliczeń nie zależy od szybkości i pamięci komputera, ale od zastosowanych metod i algorytmów [15].

Metodą numeryczną nazywa się każdą metodę obliczeniową sprowadzalną do operacji arytmetycznych dodawania, odejmowania, mnożenia i dzielenia. Są to podstawowe operacje matematyczne, znane od wieków przez człowieka, a także rozpoznawalne przez każdy procesor komputerowy. Na fundamencie tych czterech działań liczbowych można zbudować całą bazę obliczeniową dla mniej lub bardziej skomplikowanych zagadnień (np. obliczanie pierwiastka kwadratowego z liczby nieujemnej, ale też operacje całkowania i różniczkowania numerycznego). Dlatego zazwyczaj przez numerykę rozumie się dziedzinę matematyki zajmującą się rozwiązywaniem przybliżonym zagadnień algebraicznych. I rzeczywiście, odkąd zjawiska przyrodnicze zaczęto opisywać przy użyciu formalizmu matematycznego, pojawiła się potrzeba rozwiązywania zadań analizy matematycznej czy algebry. Dopóki były one nieskomplikowane, dawały się rozwiązywać analitycznie, tzn. z użyciem pewnych przekształceń algebraicznych prowadzących do otrzymywania rozwiązań ścisłych danych problemów. Z czasem jednak, przy powstawaniu coraz to bardziej skomplikowanych teorii opisujących zjawiska, problemy te stawały się na tyle złożone, iż ich rozwiązywanie ściśle było albo bardzo czasochłonne albo też zgoła niemożliwe. Numeryka pozwalała znajdować przybliżone rozwiązania z żadaną dokładnością. Ich podstawową zaletą była ogólność tak formułowanych algorytmów, tzn. w ramach danego zagadnienia nie miało

znaczenia czy było ono proste czy też bardzo skomplikowane (najwyżej wiązało się z większym nakładem pracy obliczeniowej). Natomiast wadą była czasochłonność.

W konsekwencji metody numeryczne mogą służyć do rozwiązywania konkretnych zagadnień algebraicznych (np. równania nieliniowe czy problemy własne). Na ogół jednak są one ostatnim ogniwem w łańcuchu zwanym modelowaniem. W celu określenia zachowania się jakiegoś zjawiska w przyrodzie, buduje się szereg jego przybliżeń zwanych modelami. Modele buduje się przyjmując coraz to nowe założenia i hipotezy upraszczające. Z rzeczywistego systemu fizycznego najpierw powstaje model matematyczny, czyli opis jego zjawisk przy określonych warunkach w postaci układu równań różniczkowych cząstkowych. Następny w kolejności model numeryczny polega na zamianie wielkości ciągłych na dyskretne – oznacza przejście do układu równań algebraicznych, do rozwiązania, którego posłuży wybrana metoda numeryczna [48].

2.1 Wybrane metody numeryczne

W niniejszej pracy wykorzystano szereg metod numerycznych do przedstawienia i rozwiązania modeli matematycznych, które posłużyły do dalszych badań i wykonanych symulacji. Rozpoczynając od obliczania wartości funkcji, interpolację i aproksymację, różniczkowanie i całkowanie numeryczne, rozwiązywanie układów równań liniowych i nieliniowych, oraz do rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych i cząstkowych typu hiperbolicznego.

Przy formułowaniu problemu i zadań należy zaznaczyć, iż różniczkowanie numeryczne stanowi główną część obliczeń wykonanych w dysertacji. Otóż wzory różniczkowania numerycznego znajdują zastosowanie wtedy, gdy istnieje potrzeba wyznaczyć pochodne odpowiedniego rzędu funkcji $f(x)$, która w naszych rozważaniach jest określona tablicą. Jednak zakładając podstawowy sposób konstrukcji wzorów różniczkowania sprowadza się do zagadnienia różniczkowania wzorów interpolacyjnych. Zatem dana funkcja $f(x)$, zostaje zastąpiona wielomianem interpolacyjnym $W_n(x)$, w przedziale $[a, b]$, gdzie przyjmuje postać:

$$f^{(k)}(x) = W_n^{(k)}(x) \text{ dla } a \leq x \leq b, \quad (2.3)$$

gdzie: k - oznacza rząd pochodnej.

Jeżeli błąd interpolacji $R_n(x)$ określony jest wzorem,

$$R_n(x) = f(x) - W_n(x), \quad (2.4)$$

to błąd pochodnej $r_n^{(k)}(x)$ wynosi

$$r_n^{(k)}(x) = f^{(k)}(x) - W_n^{(k)}(x) \quad (2.5)$$

W szczególności błąd różniczkowania w węzłach interpolacji, może być różny od zera, chociaż błąd interpolacji jest równy zero. Podsumowując te rozważania można stwierdzić, że z każdego wielomianu interpolacyjnego da się wyprowadzić wzór różniczkowania numerycznego. Ostatecznie w rozważaniach wykorzystuje się wzory klasyfikujące się według wykorzystywanych różnic: zwykłych, wstecznych i centralnych [31].

Ta podstawa teoretyczna przybliżyła nas do przedstawienia i zrozumienia tematyki pracy. Poniżej opisano wybrane z nich.

2.1.1 Metoda różnic skończonych

Metoda ta została zaproponowana przez A. Thom'a w latach dwudziestych XX wieku, pod nazwą „metoda kwadratów”, dla rozwiązania nieliniowego równania hydrodynamicznego. Od tego czasu metoda znalazła zastosowania w rozwiązywaniu różnych problemów. Techniki różnic skończonych oparte są na przybliżeniach, które pozwalają na zastąpienie równania różniczkowego przez równania różnic skończonych. Te przybliżenia mają formę algebraiczną, wiążą wartość zmiennej zależnej w punkcie regionu rozwiązania z wartościami w kilku sąsiednich punktach. Metoda Różnic Skończonych (MRS), jest jedną najczęściej stosowanych metod przybliżania równań różniczkowych cząstkowych za pomocą układu równań algebraicznych, który na ogół rozwiązuje się przy użyciu komputera [5], [57].

Obszary, w których są określone wyjściowe równania, pokrywa się z siatką rozwiązań, a pochodne szukanego rozwiązania są przybliżane odpowiednimi ilorazami różnicowymi, wykorzystującymi wyłącznie wartości w węzłach siatki. Tak skonstruowany schemat różnicowy służy do wyznaczenia wartości przybliżonego rozwiązania w węzłach siatki; i prowadzi on wprost do układu równań o specjalnej strukturze, związanej z lokalnym charakterem aproksymacji operatora różniczkowego. MRS jest powszechnie stosowana w wielu dziedzinach nauki i techniki, w których występują modele matematyczne oparte na równaniach różniczkowych tzw. schematy różnicowe rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych można traktować, jako szczególny wariant MRS [8].

Klasyczna metoda różnic skończonych jest przybliżoną metodą dyskretnego rozwiązywania problemów brzegowych, opisywanych zwyczajnymi lub cząstkowymi równaniami różniczkowymi [34]. Idea metody polega na zamianie operatorów różniczkowych na odpowiednie operatory różnicowe, określone na dyskretnym i regularnym zbiorze punktów; zbiór ten nazywano siatką, a jego elementy węzłami. W rezultacie wyjściowe zagadnienie brzegowe zostaje sprowadzone do układu równań, w których niewiadomymi są wartości funkcji i w pewnych przypadkach ich pochodnych.

Uogólnieniem klasycznej metody różnic skończonych jest metoda z dowolnie nieregularną siatką węzłów, wykorzystywana również do rozwiązywania problemów sformułowanych w postaci wariacyjnej. W badaniach prowadzonych w ramach pracy ograniczono się tylko do zastosowania klasycznej metody różnic skończonych w rozwiązywaniu równań różniczkowych cząstkowych; rozwiązywanie tą metodą równań różniczkowych zwyczajnych lub cząstkowych jest elementarne i przykłady zastosowań można znaleźć w podręcznikach o metodach numerycznych [16]. Przy realizacji badań podstawową kwestią było poprawne postawienie zadań, gdzie ważnym elementem jest jednoznaczność rozwiązania i jego ciągłą zależność od prawych stron równań i warunków granicznych, które gwarantują stabilność zagadnienia różniczkowego. Wykonywane zadania charakteryzowano pewnym parametrem np. długość siatki (metoda po charakterystykach). W badaniach zwrócono uwagę, czy rozwiązania przybliżone są zbieżne do rozwiązania dokładnego oraz na szybkość tej zbieżności. W ten sposób również uwzględniono informacje o numerycznej poprawności odpowiednich algorytmów.

Warto również wspomnieć o jednej z metod przybliżonego rozwiązywania zagadnień różniczkowych o Metodzie Elementów Skończonych (MES). Jest ona szczególnym przypadkiem metod wariacyjnych takich jak metoda Ritza i metoda Glerkina. Polega ona na przekształceniu zbioru równań różniczkowych opisujących zachowanie, czy właściwości jakiegoś modelu na układ równań nieliniowych. Obecnie MES jest często wykorzystywaną metodą do przybliżonego rozwiązywania zagadnień różniczkowych.

2.1.2 Metoda Eulera

Modele matematyczne przedstawione w pracy sformułowano analizując stany równowagi bilansu masowego obiektu rzeki. Efektem tych rozważań były równania różniczkowe. Taki sposób budowania modeli matematycznych uzasadnia nazwę

sformułowanie lokalnego problemu. Innym sposobem jest sformułowanie globalne, w którym rozwiązanie otrzymujemy w wyniku minimalizacji pewnego funkcjonału. Na przykład, w analizie zagadnień mechaniki płynów takim funkcjonałem jest bilans masowy. Zauważono wówczas równoważność rozwiązania, a funkcja, która minimalizuje funkcjonał jest rozwiązaniem równania Eulera.

Metoda Eulera jest jedną z najprostszych metod jednokrokowych, polega na zastąpieniu krzywej całkowej $y=y(t)$ łamaną o wierzchołkach (t_i, y_i) . W związku z tym nieskończenie małe wartości dy i dt zastępuje się skończonymi przyrostami y oraz $t=h$.

Przy ustalonej małej wartości kroku h wyznacza się kolejno punkty (t_{i+1}, y_{i+1}) :

$$\begin{cases} t_{i+1} = t_i + h \\ y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i) \end{cases} \quad (2.6)$$

gdzie: $i=0, 1, \dots, n-1, t_i \in [t_0, b]$.

Rozpoczynając od warunku początkowego (t_0, y_0) otrzymuje się następujące rozwiązanie zgodne z poniższym algorytmem:

Algorytm otwartej metody Eulera:

1. Wprowadź dane wejściowe: $f(t,y)$ - równanie różniczkowe, (t_0, y_0) – warunek początkowy, b – koniec przedziału całkowania,
2. Określ stały krok całkowania h ,
3. Wyznacz $n = \frac{b-t_0}{h}$ - liczbę iteracji,
4. Wyznacz n kolejnych punktów trajektorii (t_{i+1}, y_{i+1}) , wykorzystaj wzór (2.6).

Niemniej jednak jak wiadomo wyniki uzyskiwane mogą być mało dokładne, więc w celu zmniejszenia błędu przybliżeń zastosowano ulepszona metodę Eulera, zwana inaczej metoda punktu środkowego. Należy ona do metod jednokrokowych drugiego rzędu.

Standardowo ustala się wartość kroku całkowania h i rozpoczyna się iteracje od warunku początkowego (t_0, y_0) . W każdym kolejnym kroku korzysta się z przybliżenia uzyskanego w poprzednim kroku i z przybliżenia w tzw. punkcie środkowym.

Wprowadzając pomocnicze zmienne k_1 oraz k_2 można podać uproszczony zapis:

$$\begin{aligned} y_0 &= y(t_0) \\ k_1 &= f(t_i, y_i) \\ k_2 &= f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{hk_1}{2}\right) \\ t_{i+1} &= t_i + h \\ y_{i+1} &= y_i + hk_2 \end{aligned} \quad (2.7)$$

Algorytm ulepszonej metody Eulera:

1. Wprowadź dane wejściowe: $f(t,y)$ - równanie różniczkowe, (t_0, y_0) – warunek początkowy, b – koniec przedziału całkowania,
2. Określ stały krok całkowania h ,
3. Wyznacz $n = \frac{b-t_0}{h}$ - liczbę iteracji,
4. Wyznacz n kolejnych punktów trajektorii (t_{i+1}, y_{i+1}) , wykorzystaj wzór (2.7):
 - a. oblicz zmienne pomocnicze k_1, k_2
 - b. oblicz kolejne wartości t_{i+1}, y_{i+1} .

2.1.3 Metoda Rungego-Kutty

Metody numeryczne znalazły zastosowanie wszędzie tam, gdzie dojście do wyniku innymi sposobami jest niemożliwe lub bardzo trudne. Z metodami numerycznymi związane są takie pojęcia jak: zbieżność, dywergencja oraz dokładność. *Zbieżność* określa zdolność danej metody numerycznej do "zmierzania" w kierunku wyniku. Użytkownik jest zainteresowany, aby zastosowana metoda cechowała się maksymalną zbieżnością. Przy czym dla pewnych specyficznych danych zastosowana metoda numeryczna, zamiast prowadzić do wyniku, daje rezultaty coraz bardziej od wyniku odległe. Tę niepożądaną cechę nazywa się *dywergencją*. Czasem dywergencja dla pewnego małego zakresu danych jest ceną, jaką płacimy za korzyści wynikające z zastosowanej metody. *Dokładność* to ważna cecha metod numerycznych, jest zwykle określana przed rozpoczęciem obliczeń. Im dokładniejszy wynik chce się otrzymać, tym więcej czasu trzeba poświęcić na obliczenia. Dla niektórych metod wynik może być uzyskany z dowolnie dużą dokładnością, lecz niektóre metody dają wynik obarczony pewnym stałym błędem, zatem zwiększanie precyzji obliczeń nic tu nie pomoże. W metodach numerycznych ważny jest kompromis pomiędzy czasem obliczeń, ich dokładnością oraz uniwersalnością metody.

Jedną z takich metod, które uwzględniają powyższe cechy jest metoda Rungego-Kutty służąca do rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych. Polega ona na obliczeniu wartości $f(x, y)$ w pewnych szczególnie dobranych punktach leżących w pobliżu krzywej rozwiązania w przedziale $(x_n, x_n + h)$ i na utworzeniu takiej kombinacji tych wartości, która z dobrą dokładnością daje przyrost $y_{n+1} - y_n$ [6].

Ogólna postać metody:

$$\begin{aligned}
 t_{i+1} &= t_i + \\
 y_{i+1} &= y_i + \sum_{s=1}^m w_s k_s \quad i = 0, 1, \dots \\
 k_1 &= f(t_i, y_i) \\
 k_s &= f(t_i + c_s, y_i + \sum_{j=1}^{s-1} a_{sj} k_j) \quad \text{dla } 2 \leq m \leq s
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

gdzie: $m \geq 1$ - rząd metody,
 $s \geq 1$ - liczba kroków pośrednich,
 w_b, c_s, a_{sj} – stałe zależne od rzędu metody.

Jeżeli wartość s oznacza liczbę kroków pośrednich, zaś m oznacza rząd, to zachodzi związek $m \leq s$. Podstawiając do ogólnego wzoru $s=2$, można otrzymać wzór na metodę Eulera-Cauchy'ego, czyli jest to metoda Rungego-Kutty drugiego rzędu.

$$\begin{aligned}
 y_0 &= y(t_0) \\
 k_1 &= f(t_i, y_i) \\
 k_2 &= f\left(t_i + \frac{1}{2}, y_i + \frac{k_1}{2}\right) \\
 k_3 &= f\left(t_i + \frac{1}{2}, y_i + \frac{k_2}{2}\right) \\
 k_4 &= f(t_i + 1, y_i + k_3) \\
 y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\
 t_{i+1} &= t_i + 1
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

Najpopularniejszą jednak metodą jednokrokową jest metoda Rungego-Kutty rzędu czwartego o czterech krokach pośrednich, którego algorytm może być następujący:

Algorytm metody Rungego-Kutty rzędu czwartego [17]:

1. Wprowadź dane wejściowe: $f(t,y)$ - równanie różniczkowe, (t_0, y_0) – warunek początkowy, b – koniec przedziału całkowania,
2. Określ stały krok całkowania h ,
3. Wyznacz $n = \frac{b-t_0}{h}$ - liczbę iteracji,
4. Wyznacz n kolejnych punktów trajektorii (t_{i+1}, y_{i+1}) , wykorzystaj wzór (2.9):
 - a. oblicz zmienne pomocnicze k_1, k_2, k_3, k_4 ,
 - b. oblicz kolejne wartości t_{i+1}, y_{i+1}

3. Modele matematyczne obiektu o strukturze szeregowej

Przez model matematyczny dowolnego obiektu fizycznego, jakim jest np. odcinek rzeki rozumiemy pewną abstrakcję matematyczną wiążącą z sobą zmienne charakteryzujące stan obiektu, oddziaływanie sygnałów zewnętrznych i jego reakcję. Zmienne definiujące stan obiektu stanowią zbiór charakteryzujący skutki wcześniejszych oddziaływań. W przypadku modelu matematycznego wyrażonego np. w postaci układu równań różniczkowych stan obiektu charakteryzowany jest przez warunki graniczne (początkowe i brzegowe) i inne wymuszenia. Znajomość stanu obiektu w chwili początkowej oraz oddziaływań zewnętrznych w przyjętym przedziale czasu pozwala jednoznacznie określić reakcję obiektu na to oddziaływanie.

Modele matematyczne w stosunku do obiektów rzeczywistych stanowią zawsze uproszczenie. Ustalenie adekwatnego modelu matematycznego rzeczywistego obiektu często jest zadaniem trudnym. Według [55] trudności w sformułowaniu modelu matematycznego wynikają z dużej złożoności analizowanych obiektów oraz braku wystarczających informacji o ich własnościach. Zbyt uproszczony model może pomijać istotne własności modelowanego obiektu w konsekwencji uniemożliwić uzyskanie pełnych informacji o jego zachowaniu. Model o skomplikowanej strukturze matematycznej wymaga zwykle dużej liczby danych charakteryzujących obiekt, które można uzyskać tylko w wyniku pomiarów, a także stwarza na ogół istotne trudności matematyczne na etapie rozwiązywania równań. W praktyce model jest kompromisem pomiędzy „kosztem” rozwiązania równań i pozyskania parametrów fizycznych charakteryzujących obiekt, a wymaganą dokładnością wyniku. W każdym przypadku nadrzędnym kryterium jest cel, któremu model ma służyć.

3.1 Składniki i własności wód powierzchniowych

Wody powierzchniowe w sposób bezpośredni narażone są na wpływ skutków działalności gospodarczej człowieka, charakteryzują się one zmiennością składu fizykochemicznego oraz dużą różnorodnością substancji w nich występujących [25], [51], [60]. O ostatecznym składzie decydują produkty procesów naturalnych przebiegających w środowisku wodnym oraz zanieczyszczenia obcego pochodzenia. Poziom zanieczyszczenia wód powierzchniowych ściśle jest związany ze sposobem zagospodarowania zlewni,

stopniem degradacji środowiska oraz warunkami atmosferycznymi panującymi w danym regionie. W wodach powierzchniowych, poza substancjami obecnymi w wodach podziemnych, występują zanieczyszczenia stanowiące poważny problem z uwagi ich przynależność do substancji uciążliwych, a często toksycznych [3].

Do głównych czynników kształtujących skład wód powierzchniowych należą:

- topografia zlewni;
- budowa geologiczna zlewni i wielkość kompleksu sorpcyjnego gleb;
- procesy wietrzenia i rozpuszczania minerałów budujących zlewnię;
- procesy fizyczne i chemiczne zachodzące w środowisku wodnym;
- prędkość i natężenie przepływu wody decyduje o wielkości wymiany między substancjami występującymi w wodzie i zdeponowanymi na dnie rzek;
- wielkość powierzchni kontaktu wody z powietrzem atmosferycznym;
- mieszanie się wód o różnym składzie;
- rodzaj organizmów wodnych i aktywność przemian biologicznych;
- warunki atmosferyczne;
- sposób zagospodarowania zlewni, który decyduje o ilości i rodzaju zanieczyszczeń doprowadzanych do wód powierzchniowych ze źródeł punktowych i obszarowych;
- rodzaj obiektów hydrologicznych i stopień regulacji rzeki;
- sposób użytkowania wód;
- głębokość zbiorników wód i ich lokalizacja w stosunku do źródeł emisji zanieczyszczeń.

Ilość wymienionych czynników wskazuje, że jakość wód powierzchniowych jest funkcją wielu parametrów, których udział w ostatecznym składzie fizyczno-chemicznym wód może być różny i zmienny w czasie. Wynikiem tego jest bardzo skomplikowany mechanizm kształtowania się składu wód powierzchniowych. Jakość wód naturalnych ocenia się na podstawie wartości wskaźników fizycznych, chemicznych i biologicznych.

Substancje organiczne obecne w wodach powierzchniowych ulegają ciągłym przemianom, głównie biochemicznym, prowadzącym z jednej strony do produkcji, a z drugiej do rozkładu związków organicznych. Z uwagi na pochodzenie, substancje organiczne dzieli się na dwie zasadnicze grupy: naturalne i obce. Z uwagi zaś na formę występowania na rozpuszczone i ogólne. Do substancji naturalnych należą przede wszystkim substancje humusowe, które w wodach niezanieczyszczonych decydują o poziomie zanieczyszczenia organicznego i intensywności barwy. Do grupy

zanieczyszczeń pochodzenia naturalnego należą również białka, węglowodany, oleje, woski, celuloza, skrobia, chlorofil i inne związki syntetyzowane przez organizmy wodne lub będące ich metabolitami.

Rodzaj substancji organicznych pochodzenia obcego zależy od źródła zanieczyszczenia wody. Z opadami atmosferycznymi transportowane są wielopierścieniowe węglowodory aromatyczne (WWA) i chlorowane związki organiczne (ChZO). Spływy powierzchniowe z terenów upraw rolnych wnoszą do wód pestycydy z dróg i terenów zurbanizowanych zaś węglowodory aromatyczne i alifatyczne produkty przeróbki ropy naftowej i inne. Ze ściekami bytowo-gospodarczymi trafiają do wód między innymi substancje powierzchniowo czynne (SPC), fenole, alkohole, a ze ściekami przemysłowymi, w zależności od rodzaju surowców i wytwarzanych produktów oraz stosowanych technologii, mogą być wnoszone rozmaite substancje organiczne. Specjalną grupę wśród zanieczyszczeń obcych stanowią związki trudno podatne na rozkład biochemiczny, tzw. związki refrakcyjne.

Chlorowane związki organiczne mogą trafiać do wód ze ściekami, opadami atmosferycznymi lub mogą powstawać w wodach, do których wprowadzane są ścieki zawierające wolny chlor [18]. Związki organiczne występujące w postaci zawiesin zatażane są w osadach dennych, gdzie następnie podlegają przemianom chemicznym, biochemicznym i fizycznym. Z uwagi na występowanie warunków beztlenowych, w osadach dennych zachodzi częściowo ich beztlenowy rozkład, a gazowe produkty przechodzą do wody. Zdeponowane w osadach dennych substancje organiczne mogą przenikać do wody w czasie zwiększonego przepływu wód płynących w rzekach.

Do oceny ogólnego zanieczyszczenia wody substancjami, organicznymi wykorzystuje się następujące wskaźniki: BZT₅, (Biochemiczne Zapotrzebowanie na Tlen), utlenialność, ChZT (Chemiczne Zapotrzebowanie na Tlen), OWO (Ogólny Węgiel Organiczny), RWO (Rozpuszczony Węgiel Organiczny), absorbancja w nadfiolecie, EWCh (Ekstrakt Węglowo-Chloroformowy) i EWA (Ekstrakt Węglowo-Alkoholowy). Najlepszym wskaźnikiem zawartości związków organicznych jest OWO, którego wartość w wodach powierzchniowych wynosi 1-20 g C/m³, a w wodach z terenów bagiennych może nawet osiągać wartość ok. 300 g C/m³. W Polsce w standardowej analityce, jakości wód powierzchniowych oznaczana jest utlenialność, a w wodach bardziej zanieczyszczonych również, ChZT i BZT₅. Podwyższona utlenialność stwierdzana w wodzie charakteryzującej się zawartością związków azotu i chlorków jest wskaźnikiem zanieczyszczenia tej wody związkami pochodzenia zwierzęcego. W wypadku

zanieczyszczenia wód związkami organicznymi pochodzenia roślinnego, podwyższonej utlenialności towarzyszy zwykle intensywna barwa. Wody powierzchniowe niezanieczyszczone charakteryzują się zwykle utlenialnością ok. $4,00 \text{ g O}_2/\text{m}^3$. Wartość utlenialności obrazuje również zawartość związków nieorganicznych utleniających się w środowisku nadmanganianu potasowego, a więc wskaźnik ten tylko w przybliżony sposób określa zawartość związków organicznych w wodzie. Dawniej uważano, że z punktu widzenia higienicznego utlenialność wody ma tylko wówczas istotne znaczenie, jeżeli jest wywołana związkami pochodzenia zwierzęcego. Pogląd ten został skorygowany, ponieważ związki mierzone, jako utlenialność mogą być również prekursorami toksycznych chlorowanych związków organicznych powstających podczas dezynfekcji wody chlorem [62].

Znacznie lepszym wskaźnikiem jest, ChZT, którego wartość odzwierciedla zawartość ok. 95-100% związków ulegających utlenieniu w obecności dwuchromianu potasowego, jednakże oznaczenie jest przydatne dopiero przy wyższych wartościach wskaźnika. ChZT określa również ilość substancji trudno podatnych na rozkład biochemiczny [49].

Związki organiczne zawarte w wodach naturalnych ulegają rozkładowi wskutek działalności życiowej bakterii i innych drobnoustrojów. Do zmineralizowania związków organicznych zawartych w wodzie potrzebna jest pewna określona ilość tlenu.

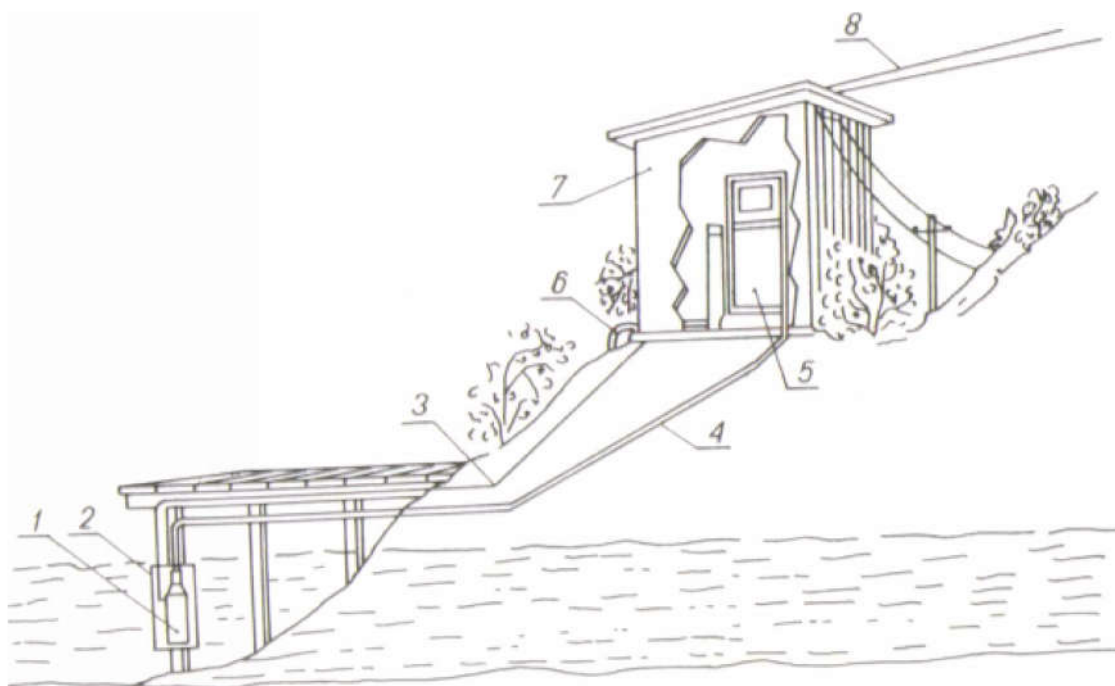
Rozpuszczony tlen (RT) spełnia rolę akceptora wodoru. Natomiast ilość tlenu potrzebna do procesu spalania związków organicznych nazywa się biochemicznym zapotrzebowaniem tlenu. Jest ono terminem umownym i określa ilość tlenu, wyrażoną w mg na 1 dm^3 wody (ścieków), potrzebną do biochemicznego utlenienia związków organicznych w wodzie w temperaturze 293 K (20°C). Szybkość biochemicznego utleniania jest nierównomierna. Początkowo proces mineralizacji związków organicznych przebiega bardzo intensywnie, a następnie ulega stopniowemu zwolnieniu. Dla wód powierzchniowych w czasie pierwszych 5 dni biochemiczne zapotrzebowanie tlenu wynosi 68% całkowitego BZT. W praktyce ten pięciodobowy okres inkubacji przyjęto za wystarczający do oceny stopnia zanieczyszczenia wody naturalnej lub ścieków. Mimo, iż BZT_5 nie może stanowić jedyne wskaźnika stopnia zanieczyszczenia wody, to jednak w szczególnym przypadku, jakim jest wyznaczanie stanu czystości dużych rzek, ocenę taką opiera się na kryterium tlenowym i jego matematycznej interpretacji. W wodzie ujmowanej do celów komunalnych wartość BZT_5 nie powinna być większa niż $4,0 \text{ g O}_2/\text{m}^3$ (wartość dopuszczalna dla wód I klasy czystości) [21], [32].

3.2 Metody pomiaru wybranych wskaźników, jakości wody

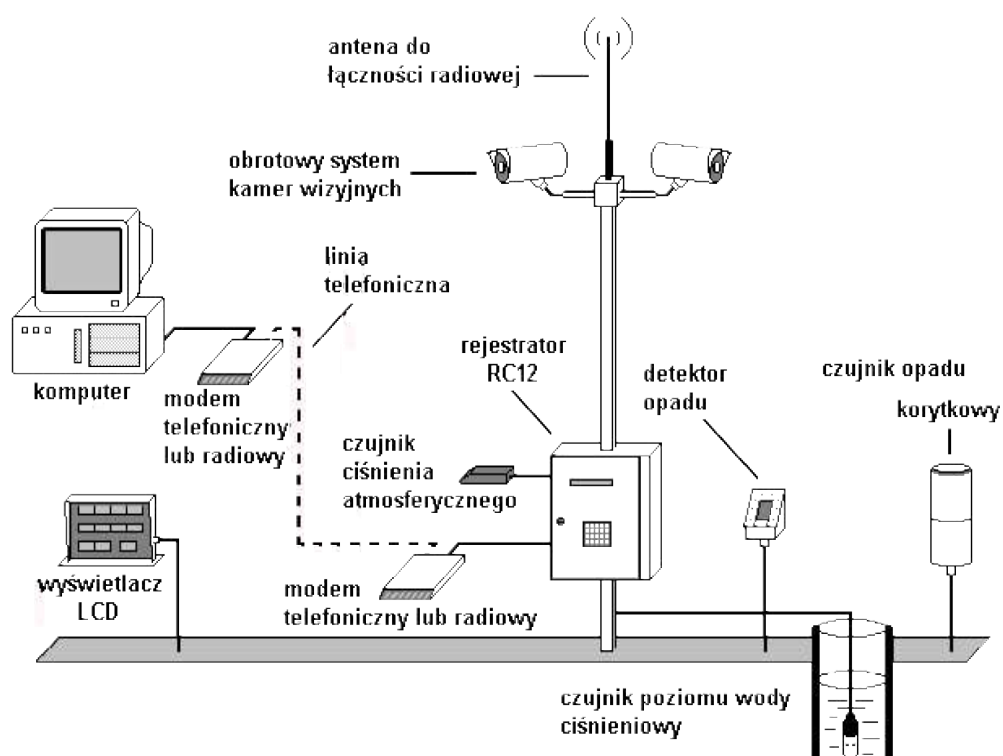
W przypadku konieczności badania, jakości wody lub składu ścieków przez dłuższy czas uciążliwe ręczne pobieranie próbek może być zastąpione przez pobieranie za pomocą automatycznych urządzeń. Istnieją różne typy tych urządzeń, od bardzo prostych, które mogą być wykonane przez użytkownika, do złożonych aparatów produkowanych fabrycznie. Stacja automatyczna jest to zespół aparatów służących do automatycznych, ciągłych pomiarów, jakości wody lub składu ścieków bez stałej obsługi człowieka. Budowa stacji zależy w dużym stopniu od jej przeznaczenia, lokalizacji, składu badanych wód i zakresu oznaczanych parametrów. Zwykle stacja automatyczna składa się z następujących podstawowych elementów:

- instalacji do pobierania wody,
- zbiornika przepływowego,
- zespołu czujników pomiarowych,
- przetwornika sygnałów z miernikiem,
- rejestratora,
- urządzenia transmitującego.

Schemat automatycznej stacji do pomiaru, jakości wody przedstawiają rysunki 3.1 i 3.2.



Rys. 3.1 Automatyczna stacja do pomiaru, jakości wody: 1 - pompa, 2 – osłona pompy, 3 - zasilanie pompy energią, 4 - przewód doprowadzający wodę, 5 – zestaw pomiarowy, (5-odpływ wody, 7-budynek stacji, 8-linia telemetryczna)[35]



Rys. 3.2 System pobierania i transmisji danych z stacji telemetrycznych [24]

W takich stacjach można mierzyć parametry, jakości wód. Do nich należą: rozpuszczony tlen, pH, przewodność elektryczna, potencjał redukcyjno-utleniający (redoks), temperatura, mętność, zawartość związków organicznych mierzona w nadfiolecie. Do pomiarów ciągłych stosuje się także membranowe elektrody jonoselektywne, które pozwalają na pomiar stężenia chlorków, fluorków, azotanów. Można również używać autoanalyzerów przystosowanych do pracy w warunkach terenowych bez stałego nadzoru. Prowadzone są liczne próby wykorzystania do ciągłych pomiarów w automatycznych stacjach także innych aparatów, np. spektrofotometru absorpcji atomowej, analizatora do oznaczania węgla organicznego, chromatografu gazowego. Są to jednak aparaty o złożonej budowie, zawierające często części poruszające się oraz wymagające częstego nadzoru. W przypadku stosowania takich aparatów automatyczna stacja przekształca się na ogół w laboratorium do ciągłych pomiarów. Stacje automatyczne są używane do ciągłych pomiarów, jakości wody rzecznej. W takim przypadku zestaw pomiarowy jest zwykle usytuowany w wolno stojących budynkach o małej powierzchni, znajdujących się bezpośrednio nad brzegami rzek. Stacje mogą też być lokalizowane w pomieszczeniach przy stacjach uzdatniania wody, ujęć wody, siłowniach i innych budowlach wodnych, które mogą być zasilane energią elektryczną z sieci lub z własnego generatora rys.3.3.



Rys.3.3 Widok stacji telemetrycznej(opracowanie własne)

Znane są też stacje ruchome umieszczone w samochodach lub na statkach. Takim urządzeniem jest sonda tlenowa badająca poziom rozpuszczonego tlenu.

Rozpuszczony tlen (RT)

Tlen rozpuszczony w wodzie pochodzi głównie z powietrza oraz w pewnych przypadkach z procesów fotosyntezy. Występuje prawie zawsze w wodach stykających się bezpośrednio z atmosferą, a więc w wodach powierzchniowych i płytkich wodach podziemnych. Zawartość tlenu rozpuszczonego w wodzie jest jednym z najważniejszych wskaźników, jakości wody. Tlen rozpuszczony jest niezbędny do życia wodnych organizmów żywych. Ma podstawowe znaczenie dla wszelkich procesów chemicznych i biochemicznych zachodzących w wodach naturalnych. Procesy zachodzące z udziałem tlenu zwane są procesami aerobowymi. Procesy aerobowe prowadzą do zmniejszenia zanieczyszczeń w wodach naturalnych. W wodach powierzchniowych, zanieczyszczonych substancjami organicznymi, rozpuszczony tlen zużywany jest w procesach biochemicznego rozkładu tych związków.

Zawartość tlenu w wodzie ulega ciągłym zmianom. W wodach powierzchniowych stężenie tlenu jest zwykle niższe latem niż zimą. W wyższej temperaturze zmniejsza się rozpuszczalność tlenu i zwiększa szybkość procesów biochemicznych zużywających tlen. Zawartość rozpuszczonego w wodzie tlenu podaje się w $[\text{mg}/\text{dm}^3]$ lub w procentach

nasycenia wody tlenem. W określonych warunkach temperatury pod ciśnieniem atmosferycznym może rozpuścić się w wodzie określona ilość miligramów tlenu w litrze wody. Ilość ta daje nasycenie pełne, czyli 100%.

Metody oznaczania rozpuszczonego tlenu:

A. Metoda Winklera – jest metodą oznaczania rozpuszczonego tlenu i dotychczas powszechnie stosowaną. Tlen rozpuszczony w wodzie utlenia w środowisku alkalicznym wodorotlenek manganawy do związków manganu czterowartościowego.

B. Metoda odpędzania – jest to metoda wyeliminowania wpływu substancji przeszkadzających jest odpędzanie (wydmuchanie) z wody rozpuszczonego tlenu i oznaczanie jego zawartości w fazie gazowej.

C. Metoda radiometryczna – polega na utlenieniu talu 204 za pomocą tlenu zawartego w badanej próbce).

D. Metoda konduktometryczna – polega na reakcji rozpuszczonego tlenu z substancjami, które przechodzą wówczas w formę jonową i zwiększają przewodność elektryczną wody.

E. Metoda polarograficzna – w metodzie tej mierzy się natężenie prądu powstałego w wyniku redukcji tlenu zawartego w roztworze na elektrodzie rtęciowej

F. Sonda tlenowa – wynalezienie sondy tlenowej przyczyniło się do powszechnego zastosowania metod instrumentalnych przy pomiarach zawartości tlenu. Sonda tlenowa składa się z dwóch stałych elektrod, cienkiej warstwy elektrolitu otaczającego elektrody i membrany przepuszczającej tlen. Membrana oddziela elektrody i elektrolit od badanej próbki. Membrana nieprzepuszczalna dla zanieczyszczeń zawartych w wodzie, a przepuszczalna dla cząstek tlenu pozwala na stałe utrzymanie czystych powierzchni elektrod. W ten sposób eliminuje się wpływ wielu substancji występujących w wodzie i ściekach. Oznaczenie polega na pomiarze natężenia prądu w wyniku redukcji cząstek tlenu na katodzie. W polarografii prąd dyfuzyjny zależy od szybkości dyfuzji tlenu w badanym roztworze. W przypadku elektrody membranowej prąd dyfuzyjny zależy od szybkości dyfuzji tlenu przez półprzepuszczalną membranę. Rozróżnia się dwa typy sond tlenowych:

- a) ogniwo galwaniczne,
- b) sondę typu woltametrycznego.

Zasadnicze różnice między nimi są następujące: w przypadku ogniwa galwanicznego przez układ płynie prąd w wyniku reakcji zachodzących na elektrodach. Natężenie prądu zależne od stężenia tlenu można mierzyć mikroamperomierzem. W sondzie typu

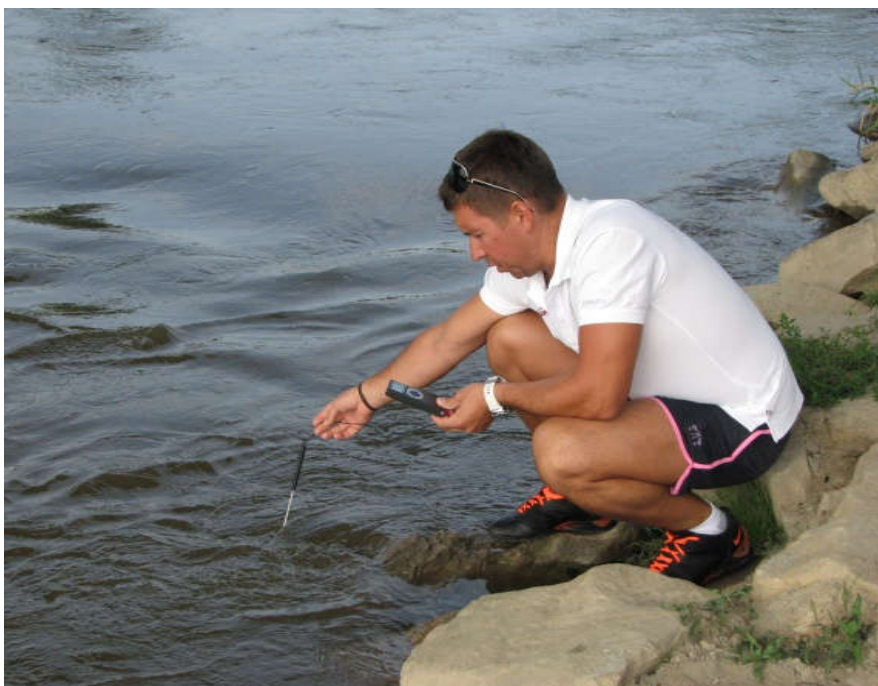
woltametrycznego do elektrod przykładają się zewnętrzne, stałe napięcie w celu polaryzowania elektrody pomiarowej, podobnie jak w klasycznej metodzie polarograficznej.



Rys. 3.4 Tlenomierz oznaczania deficytu RT (opracowanie własne)

Sonda tlenowa (patrz. rys. 3.4) wykazuje wiele zalet w stosunku do metody miareczkowej Winklera i do innych metod instrumentalnych [64]:

- sonda umożliwia pomiar aktywności tlenu, co ma istotne znaczenie w procesach biochemicznych występujących w środowisku;
- pomiar zawartości tlenu jest szybki i prosty; sonda pozwala na pomiar zawartości tlenu w zanieczyszczonych roztworach;
- sonda może być stosowana do pomiaru szybkości zużycia tlenu w procesach biochemicznego rozkładu;
- sonda pozwala na pomiary w terenie in situ oraz pomiary ciągłe;
- sonda może być wykorzystana do ciągłego pomiaru tlenu w urządzeniach do oczyszczania ścieków, np. w komorach osadu czynnego.



Rys. 3.5 Pomiar sondą tlenową poziomu zawartości tlenu w rzece przez autora

Przy pomiarze zawartości tlenu sondą tlenową występują również pewne ograniczenia:

- membrana elektrody może ulec zanieczyszczeniu np. substancjami olejowymi, co wpływa na wyniki pomiaru;
- gazy rozpuszczone w badanej wodzie, takie jak SO_2 , CO_2 i H_2S , mogą przenikać przez membranę i zanieczyścić aktywną powierzchnię elektrody, co powoduje błędne wskazania;
- wymianę membrany należy przeprowadzić bardzo starannie, tak, aby nie zanieczyścić elektrod i nie pozostawić pod membraną pęcherzyka powietrza (pęcherzyk powietrza może znacznie przedłużyć czas odpowiedzi);
- poprawność wskazań sondy tlenowej należy okresowo sprawdzać w stosunku do roztworów o znanym stężeniu tlenu; zawartość tlenu w roztworach wzorcowych określa się zwykle metodą Winklera.

Sondy tlenowe są obecnie powszechnie stosowane do pomiarów zawartości rozpuszczonego tlenu w wodzie i ściekach. Nadają się one do pomiarów ciągłych.

Biochemiczne zapotrzebowanie na tlen (BZT)

Biochemiczne zapotrzebowanie na tlen, jako wskaźnik zanieczyszczenia wody (zob. p. 3.1) jest to pojęcie umowne, które określa ilość tlenu potrzebną do utlenienia związków organicznych w wodzie w procesach biochemicznych w warunkach aerobowych. Umownie przyjęto oznaczanie BZT w temperaturze 20°C . Procesy biochemicznego rozkładu substancji organicznych odbywają się w okresie ok. 20 dni,

prowadząc do całkowitej stabilizacji, tj. przekształcenia związków organicznych w proste stabilne związki nieorganiczne. Końcową fazą procesów biochemicznych jest nitrifikacja związków azotowych. Procesy biochemiczne najintensywniej przebiegają przez pierwszych 5 dni, dlatego też często wykonuje się oznaczenie wielkości BZT₅ przyjmowanej za wskaźnik zanieczyszczenia wody łatwo rozkładalnymi substancjami organicznymi.

Oznaczenie BZT wykonuje się często metodą rozcieńczeń, która polega na przechowywaniu próbek badanej wody nierozcieńczonej i po odpowiednim rozcieńczeniu w termostacie w temperaturze 20°C, w butelkach szklanych z korkiem doszlifowanym. Zawartość tlenu na początku i końcu okresu inkubacji określa się metodą Winklera lub mierzy sondą tlenową. Na podstawie pomiaru ilości tlenu zużytego w procesach biochemicznego rozkładu oblicza się BZT. Metoda rozcieńczeń jest wykorzystywana zwykle do pomiarów BZT₅. W metodzie rozcieńczeń oznacza się stężenie tlenu rozpuszczonego w badanej próbce wody, przechowywanej w butelce napełnionej pod korek, bez pozostawienia pęcherzyków powietrza. Ilość tlenu rozpuszczona w roztworze powinna wystarczyć na rozkład substancji organicznych zawartych w próbce [53].

W metodach instrumentalnych próbkę umieszcza się w zamkniętym naczyniu, a nad próbką pozostawia się warstwę powietrza lub czystego tlenu. W miarę zużywania się tlenu rozpuszczonego w próbce wody w procesach biochemicznego rozkładu substancji organicznych tlen z warstwy gazowej przenika do roztworu. Mierzy się zawartość tlenu w warstwie gazowej.

Instrumentalne metody pomiaru BZT można podzielić na metody pomiaru przy obniżającym się i przy stałym cząsteczkowym ciśnieniu tlenu w warstwie gazowej. W metodach z obniżającym się ciśnieniem tlenu, w wyniku jego zużycia w procesie biochemicznego rozkładu substancji organicznych, zużycie tlenu mierzy się przez pomiar objętości lub ciśnienia gazów nad badaną próbką.

Podstawową wadą stosowanych powszechnie metod oznaczania BZT jest długi, kilkudobowy czas inkubacji próbek. Od rozpoczęcia do zakończenia pomiarów upływa wiele godzin, wskutek czego praktyczna przydatność wyników jest ograniczona. Dlatego od wielu lat podejmowane są wysiłki w celu skrócenia czasu oznaczania przy jednoczesnym zachowaniu jego istoty, tj. symulacji naturalnych warunków biochemicznego rozkładu materii organicznej w wodzie i ściekach.

Przykładem możliwości pomyślnego rozwiązania tego problemu jest metoda opracowana przez firmę Siepmann i Teutscher [47]. W metodzie tej oznaczanie BZT

polega na pomiarze zużycia tlenu w reaktorze, do którego dopływają ścieki rozcieńczone wodą bogatą w tlen. Stężenie substratu organicznego utrzymywane jest na stałym poziomie. Teoretyczną podstawą metody jest kinetyczny model reakcji biochemicznej Michaelisa i Mentena [47]. Opracowane urządzenie wykorzystywane jest głównie do ciągłej kontroli, jakości ścieków surowych oraz skuteczności działania oczyszczalni ścieków bytowo-gospodarczych i przemysłowych. Dotychczasowe zastosowania wskazują, że precyzja oznaczania BZT krótkotrwałą metodą jest około dziesięciokrotnie większa od precyzji uzyskiwanej w konwencjonalnej, 5-dobowej metodzie rozcieńczeń [12]. Ze względu na fakt, że pomiaru dokonujemy w reaktorze, do którego dopływają ścieki rozcieńczone wodą bogatą w tlen, metoda ta nie może być zastosowana do pomiaru wskaźnika BZT w swobodnie płynącej wodzie w rzece.

3.3 Matematyczne modele biochemicznie zanieczyszczonej rzeki

Rzeki i ich czystość odgrywają niezwykle ważną rolę. Stanowią one ogólny cykl obiegu wody w danym środowisku. Podstawową ich cechą jest szybka wymiana danej ilości wody. Rzeki wpływają na życie społeczności ludzkich i jednocześnie poddane są silnym oddziaływaniom antropogenicznym. Właśnie na rzekach, bardziej niż w jakichkolwiek innych elementach środowiska naturalnego, prowadzi się różnorakie działania inżynierskie. Działania te mają na celu ochronę terenów przyległych przed destrukcyjnym działaniem rzeki w okresie wezbrań powodziowych, z drugiej zaś strony umożliwienie wykorzystania płynącej słodkiej wody do zaspokojenia różnych potrzeb. Rzeki wykorzystuje się do różnych celów np.: źródło wody dla ludności, komunikacyjnych, energetycznych oraz jako materiał chłodniczy w przemyśle i znaczący czynnik w rolnictwie. Jednocześnie są one odbiornikiem wód zużytych lub przetworzonych zarówno przez ludność, jak i przemysł. W konsekwencji rzeki przenoszą rozmaite substancje zmieniające, jakość ich wód. Substancje te podlegają ewolucji w czasie i przestrzeni w wyniku kompleksu procesów fizycznych, chemicznych i biologicznych. Jako ważny element życia i gospodarki, rzeki były i są przedmiotem dużego zainteresowania [33], [63].

Uwzględniając powagę badań należy podkreślić, iż zasoby wodne w Polsce, przypadające na jednego mieszkańca, są mniejsze niż w krajach sąsiednich i znacznie niższe niż przeciętne w Europie (zaledwie ok. 36% średniej europejskiej). Dlatego, też opis

i analiza przepływu wody w rzece jest bardzo interesującym i złożonym problemem naukowym. Fizyczna analiza zjawiska przepływu dostarcza ilościowego opisu ruchu wody, co pozwala z kolei na formułowanie modeli matematycznych, mających duże znaczenie praktyczne, szybki zaś rozwój techniki komputerowej umożliwia ich praktyczną realizację. W konsekwencji od pewnego czasu obserwuje się szerokie zastosowanie modelowania matematycznego w hydraulice rzek [33], [65].

Model matematyczny dowolnego systemu fizycznego, a więc i odcinka rzeki, można uzyskać dwiema drogami. Jedną z nich jest metoda analityczna. Metoda ta polega na analizie struktury systemu i jego właściwości opierając się o podstawowe zasady zachowania masy. Druga droga poszukiwania modelu matematycznego, nazywana metodą eksperymentalną lub empiryczną, polega na uzyskaniu opisu matematycznego procesu na podstawie wyniku eksperymentu na badanym obiekcie. O modelu uzyskanym w ten sposób mówi się, że jest modelem funkcjonalnym. Jest to taki model, który dla określonej klasy sygnałów wejściowych wspólnych dla obiektu i modelu daje na wyjściu w przybliżeniu takie same sygnały jak obiekt. W takiej sytuacji nie trzeba znać struktury fizycznej obiektu, niemniej jednak wymagane jest wcześniejsze arbitralne założenie jego struktury matematycznej. W hydraulice rzek stosuje się zarówno modele o dużym stopniu szczegółowości, jak i modele prostsze, umożliwiające szybkie proste obliczenia przy minimalnej liczbie wymaganych danych. Pierwsza sytuacja występuje np. w przypadkach zagadnień migracji zanieczyszczeń, które wymagają znajomości pola prędkości i głębokości. Druga sytuacja dotyczy na przykład propagacji fal wezbraniowych. Tutaj zasadniczą informacją jest wielkość kulminacji i czas jej wystąpienia, a także czas trwania wezbrania. Odpowiedź na te pytania można uzyskać, stosując stosunkowo proste modele, wymagające niewielkiej liczby danych. Należy jednak pamiętać, że zakres ważności uproszczonych modeli jest znacznie węższy i ograniczony do przypadków, w których spełnione są założenia będące podstawą uproszczenia modeli ogólniejszych.

Budowa modeli matematycznych obiektów fizycznych metodą analityczną polega na stosowaniu ogólnych praw zachowania masy, energii i pędu. Wobec tego, mimo dużej różnorodności analizowanych procesów, ich modele matematyczne są często bardzo podobne. Do opisu przepływów w kanałach otwartych, podobnie jak dla wszystkich systemów dynamicznych, stosuje się prawa zachowania dla stanów nieustalonych, które charakteryzują się zmiennym w czasie stopniem akumulacji wielkości podlegającej zachowaniu. Można tutaj rozróżnić dwa poziomy stosowania zasad zachowania prowadzące do różnych typów równań. W pierwszej zasadzie zachowania stosuje się w

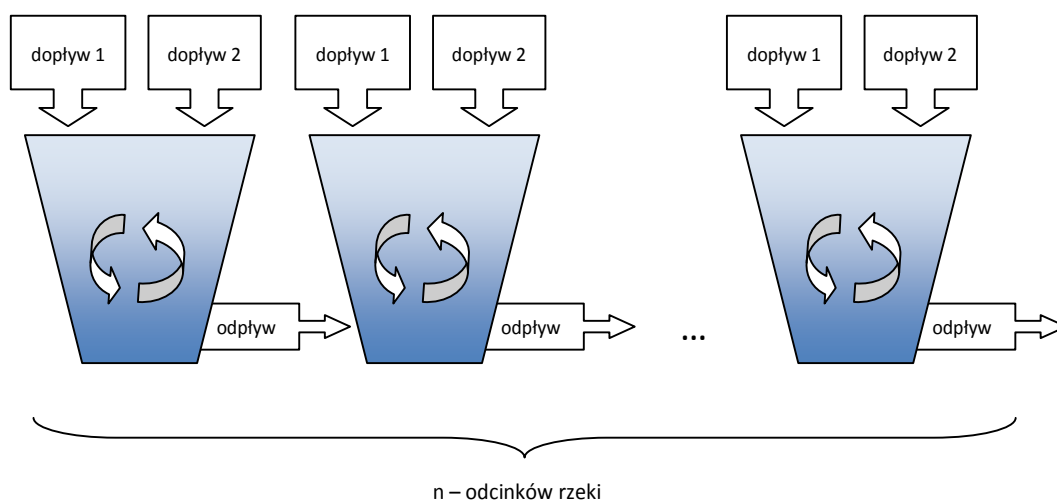
skali mikro, w drugiej zaś w skali makro. Zasady zachowania stosowane w skali mikro (lokalnie) prowadzą do równań różniczkowych cząstkowych. Ich elementami są pochodne względem czasu (zwykle I rzędu) oraz pochodne względem zmiennych przestrzennych zarówno pierwszego, jak i wyższych rzędów. Modele w postaci równań różniczkowych o pochodnych cząstkowych nazywa się modelami o parametrach rozłożonych. Większość modeli opisujących przepływy w kanałach to właśnie modele tego typu. Z kolei zasady zachowania stosowane w skali makro prowadzą do równań różniczkowych o pochodnych zwyczajnych, przy czym są to zawsze równania I rzędu. Niezbędnymi elementami tych równań są tylko pierwsze pochodne względem czasu. Nie występuje w nich zmienność przestrzenna, co oznacza, że wszystkie właściwości obiektu sprowadzono do punktu. Modele matematyczne w postaci tego typu równań nazywa się modelami o parametrach skupionych.

Przepływ w kanałach otwartych jest jednym z ważniejszych działów hydromechaniki i hydrauliki. Spośród innych form przepływów wód powierzchniowych ze swobodnym zwierciadłem, ten przypadek przepływów wyróżnia możliwość założenia jednowymiarowości przestrzennej zjawiska. Wynika to ze specyficznych właściwości rzeki. Jest to mianowicie struktura, której wymiary geometryczne pozostają w wielkiej dysproporcji względem siebie. Zarówno głębokości rzek, rzędu kilku lub kilkunastu metrów, jak i ich szerokości, zwykle rzędu setek metrów, są nieporównywalnie małe z ich długością, liczącą dziesiątki, setki lub tysiące kilometrów. To powoduje, że zasadniczo w korytach rzek woda płynie wzdłuż ich osi, natomiast przepływy w kierunkach prostopadłych do niej nie mają, poza lokalnymi przypadkami, większego znaczenia. Inaczej można powiedzieć, że wektory prędkości skierowane są wzdłuż osi kanału. Jednowymiarowość zjawiska przepływu powoduje, że do opisu różnych jego form stosuje się równania z jedną zmienną przestrzenną x . Drugą zmienną niezależną może być czas t . Wystąpi on, gdy badany proces jest nieustalony. W konsekwencji przepływy wody w kanałach otwartych opisują równanie różniczkowe o pochodnych cząstkowych, gdy jest on zmienny w czasie lub zwyczajnych, gdy przepływ jest ustalony. Liczba występujących typów równań jest ograniczona i sprowadza się do:

- równań i układów równań różniczkowych o pochodnych cząstkowych I rzędu typu hiperbolicznego lub parabolicznego,
- równań różniczkowych o pochodnych cząstkowych II rzędu typu parabolicznego
- równań różniczkowych zwyczajnych,
- równań całkowych.

Rozwiązanie wymienionych równań wymaga określenia dodatkowych warunków. Ze względu na złożoną geometrię koryt rzecznych, złożoną postać warunków brzegowych oraz nieliniowości, wymienione równania nie mają rozwiązań analitycznych. Jedynym skutecznym narzędziem stosowanym do ich rozwiązywania są metody numeryczne. Gwałtowny rozwój narzędzi elektronicznej techniki obliczeniowej spowodował, iż wiele metod numerycznych, znanych od dawna i niewykorzystywanych z powodu wymaganego nakładu obliczeń, zaczęto z powodzeniem stosować do rozwiązywania równań z zakresu hydrauliki rzek. Jednocześnie nowe możliwości obliczeniowe stymulują poszukiwania nowych metod i algorytmów numerycznych.

Modele matematyczne zanieczyszczonej rzeki przybierały różne postacie w zależności od celu, gdzie mają być zastosowane, aby obrazować odpowiednie części składowe i opisywać zależności tam występujące. W ich skład wchodzi równania łączące ważne wielkości wejściowe, wyjściowe, a także zmienne stanu. Jednym z możliwych podejść w konstruowaniu modelu rzeki jest przyjęcie jej umownego podziału na fragmenty zwane odcinkami lub podobiektami. Każdy taki odcinek jest opisany stosownymi równaniami i posiada połączenia tylko bezpośrednimi sąsiadami. Proponowany w ten sposób model dla rzeki składa się z wielu podobiektów, a jego struktura jest ściśle szeregową. Ogólny schemat modelu rzeki dla takiej interpretacji przedstawia rys. 3.6.



Rys.3.6 Reaktory z ciągłym mieszaniem w układzie szeregowym (opracowanie własne)

Procesy fizyczno – biologiczne przebiegające w wodach rzecznych zanieczyszczonych ściekami pochodzenia organicznego mogą spowodować samooczyszczanie się rzeki i polepszyć, jakość wody. Proces ten może być spowolniony w wyniku nadmiernego zanieczyszczenia.

Punktem wyjściowym przy modelowaniu zanieczyszczeń w wodzie jest bilans tlenowy, który opisany jest przez dwa wskaźniki, jakości wody: biochemiczne zapotrzebowanie tlenu BZT i rozpuszczony tlen RT szczegółowo opisane w punkcie 3.2. Badania prowadzone przez Streetera i Phelps [61] odnoszące się do stężenia BZT i RT w rzekach i stanowią punkt wyjścia przy modelowaniu matematycznym, jakości wody.

Zużycie tlenu opiera się na założeniu, sformułowanym przez Streetera – Phelps, które mówi, że biochemiczny rozkład substancji organicznych przebiega zgodnie z równaniem różniczkowym kinetyki reakcji fizykochemicznej pierwszego rzędu. Równania te dla stałej objętości mieszaniny wody i zanieczyszczeń przyjmują postać: Prędkość rozkładu substancji organicznych dla BZT opisuje równanie:

$$\frac{dx_1}{dt} = -k_1 x_1, \quad x_1(t_0) = x_{10} \quad (3.1)$$

gdzie: x_1 [mg/l] - stężenie BZT,

t [doba] - czas,

k_1 - współczynnik szybkości reakcji BZT

Zmiana rozpuszczonego tlenu RT w wodzie:

$$\frac{dx_{2S}}{dt} = -k_2 x_1 + k_3 (x_{2N} - x_{2S}) + a, \quad x_{2S}(t_0) = x_{20} \quad (3.2)$$

gdzie: x_{2S} [mg/l] - stężenie RT,

t [doba] - czas,

k_2 - współczynnik szybkości wpływu BZT na RT,

k_3 - współczynnik szybkości pobierania tlenu z atmosfery,

x_{2N} [mg/l] - zawartość tlenu w wodzie przy nasyceniu,

a [mg/l doba] - intensywność pobierania tlenu.

Oznaczając przez x_2 deficyt RT interpretowany, jako [41]:

$$x_2 = x_{2S} - x_{2N} \quad (3.3)$$

Otrzymamy zależność opisującą zmianę deficytu RT w czasie [41]:

$$\frac{dx_2}{dt} = -k_2x_1 - k_3x_2 + a \quad x_2(t_0) = x_{20} \quad (3.4)$$

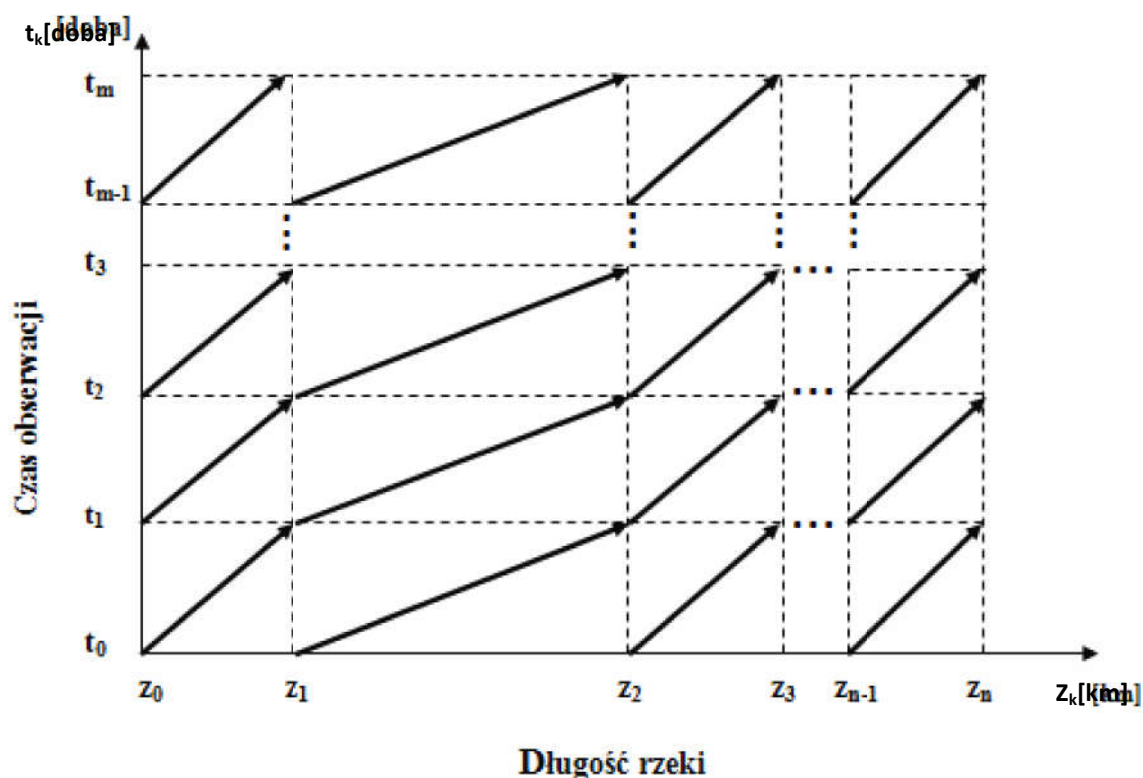
Równania (3.1), (3.2) i (3.3) można zapisać w postaci wektorowej [43]:

$$\frac{dx}{dt} = Ax + Bw \quad x(t_0) = x_0 \quad (3.5)$$

Gdzie: $A = \begin{bmatrix} -k_1 & 0 \\ -k_2 & -k_3 \end{bmatrix}$ - macierz stanu, x - wektor $x = col[x_1 \ x_2]$, B - macierz

sterowań, w - wektor wymuszeń zewnętrznych i sterowań. Współczynniki k_1, k_2, k_3 zależą głównie od temperatury, a ich wartości przyjmuje się w granicach od 0.1 – 0.4 dla k_1, k_2 oraz 0.1 – 0.2 dla k_3 .

Podobną zależność wykazuje x_{2N} i waha się w granicach 9.2 – 14.6 [mg/l] dla temperatur 0 [°C] i 20 [°C]. W celu łatwiejszej interpretacji stanu zanieczyszczeń wody zamiast stężenia RT stosowany będzie w dalszych rozważaniach jego deficyt, określony wzorem (3.3). Interpretacja przedstawiona na rys. 3.6 dotyczy fragmentu rzeki o małej długości, w którym odpływ z jednego zbiornika jest dopływem następnego. Można, więc podzielić rzekę na wiele jej fragmentów interpretowanych indywidualnie, jako podobiekty. Rozważając rzekę odpowiednio podzieloną na odcinki, mamy możliwość dokonania dla nich pomiarów RT. Należy zauważyć, iż czas przepływu przez odcinki (podobiekty) zależęć będzie od ich długości i szybkości przepływu, co wiąże się z doбором parametrów dyskretyzacji po czasie dt oraz po długości dz . Do rozważań przyjęto, iż pomiary dokonywane będą wzdłuż charakterystyk (swobodnie przemieszczającej się pewnej objętości wody), które będą wyznaczane w zadanym czasie obserwacji i długości rzeki. Obszar ten składa się z wielu charakterystyk, które mogą rozpoczynać się na dowolnej długości z_k (od z_0 do z_n), a także w dowolnej chwili czasowej t_k (od t_0 do t_m). Efektem tego jest zbiór charakterystyk obejmujących cały rozważany fragment rzeki, w którym na pewnych obszarach nachylenia charakterystyk będą różne, co wynika z prędkości nurtu rzeki. Interpretację graficzną tego podejścia przedstawia rys. 3.7.

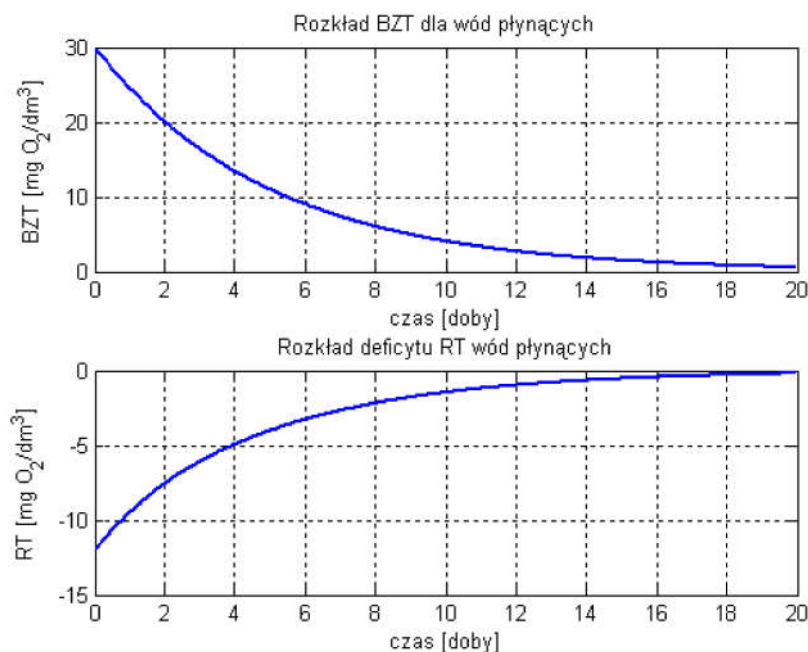


Rys. 3.7 Charakterystyki w obszarze przestrzenno – czasowym

W oparciu o powyższy model matematyczny przeprowadzono szereg badań symulacyjnych na hipotetycznej rzece o następujących parametrach:

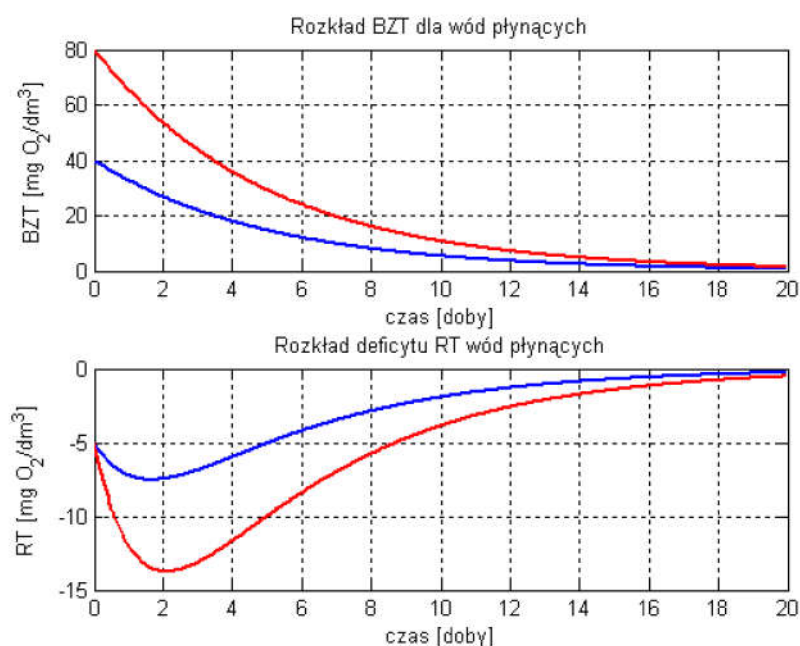
- $v = 20[km / d]$, d – doba - średnia prędkość przepływu rzeki
- $t_m = 10[dni]$ - czas obserwacji
- $z_n = 200[km]$ - długość rzeki
- $x_1 = 30[mg / l]$ - warunek początkowy BZT
- $x_2 = -12[mg / l]$ - warunek początkowy RT
- współczynniki: $k_1 = 0.2, k_2 = 0.185, k_3 = 0.71$

Rzeki mają zdolność do samooczyszczania tzn. w miarę upływu czasu zanieczyszczenia w postaci BZT i deficytu RT zmniejszają się (zob. rys. 3.8) [50]. Występowanie dużego deficytu RT przy znacznych wartościach BZT, jest zjawiskiem naturalnym. W procesach biochemicznych o dużych zapotrzebowaniach na tlen zwiększa się jego deficyt.



Rys. 3.8 Rozkład stężenia BZT i RT

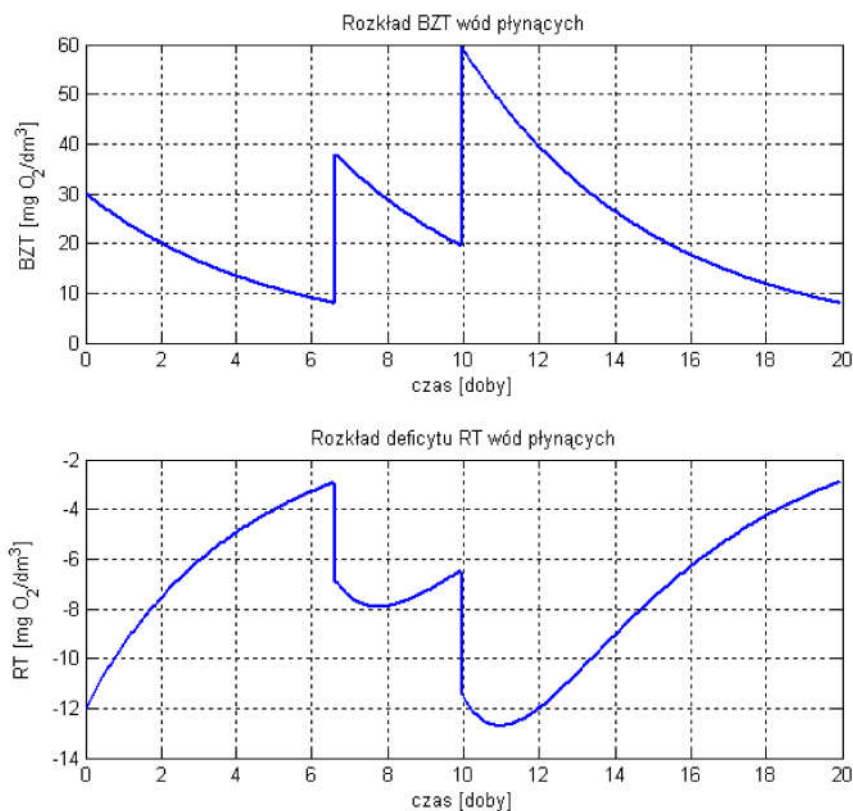
Przeprowadzając szereg badań symulacyjnych przy uwzględnieniu różnych wartości początkowych, zauważono istotny wpływ BZT na RT. Warte uwagi jest sytuacja, gdy w rzece występuje deficyt tlenowy, a dopływające zanieczyszczenia przyjmują wartości kilkudziesięciu mg/l BZT. Wynikiem tego jest pojawienie się jeszcze największego deficytu tlenowego, ale dopiero po kilku dniach (zob. rys.3.9). Oznacza to, że najniebezpieczniejsze warunki w rzece pojawią się po upływie kilku dni co równoważne jest kilkudziesięciu kilometrom od dopływu np. bocznego zanieczyszczeń.



Rys. 3.9 Rozkład BZT i RT w rzece, przy różnych warunkach początkowych

Takie sytuacje przedstawiają rys. 3.10, w którym występują dwa dopływy boczne w 7-mej i 10-tej dobie licząc od początku przepływu rzeki. Przeprowadzając szereg badań symulacyjnych można zauważyć, że duże dopływy zanieczyszczeń występujące w małych odległościach prowadzą do występowania bardzo niebezpiecznych warunków w rzece. Pojawienie się dopływów o dużych stężeniach BZT powoduje wzrost wartości BZT i deficytu RT w rzece (sytuacja jak na rys. 3.10). Największy deficyt RT obserwujemy po pojawieniu się drugiego dopływu po 11 dobach obserwacji, pomimo że największa wartość BZT występuje w 10-tej dobie.

Długo utrzymujące się warunki o dużym niedoborze tlenu pogarszają, jakość wody, co prowadzi do zagrożenia dla organizmów żyjących w wodzie. Analizując przebiegi czasowe na rysunkach 3.9 oraz 3.10 można zaobserwować „przesunięcie się” w dół rzeki największego deficytu tlenowego względem występowania dopływów bocznych.



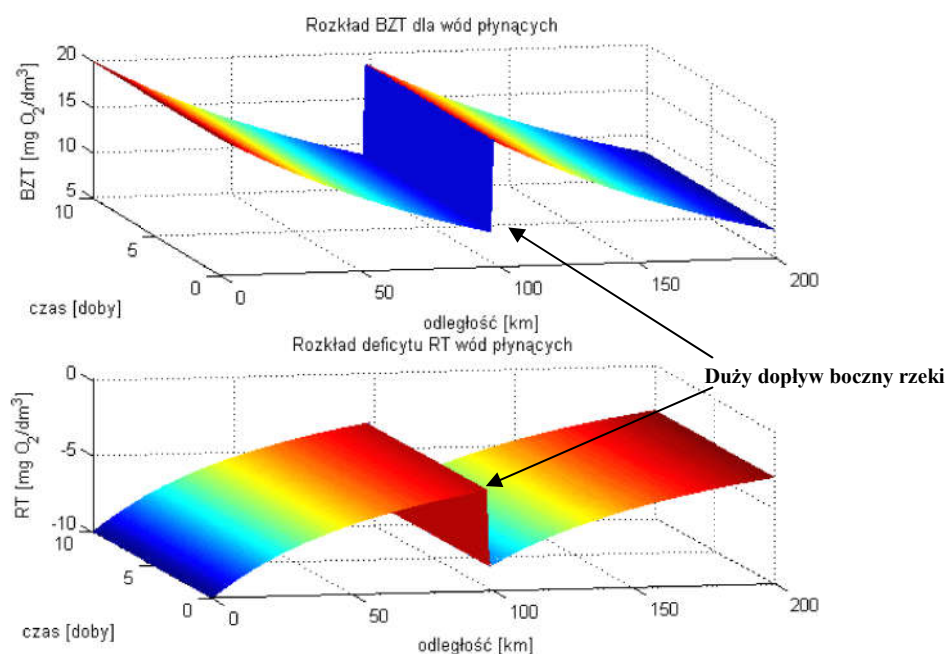
Rys. 3.10. Rozkład BZT i RT dla rzeki z kilkoma dopływami

Zaprezentowane badania dotyczyły tylko jednej charakterystyki. Wektor stanu $x(z,t)$ zawierający wskaźniki BZT, deficyt RT zależny jest od długości i czasu reprezentuje stan swobodnie płynącej wody. W celu uzyskania jego wartości dla dowolnej pary zmiennych niezależnych z i t należy rozwiązać równania 3.5 dla wielu charakterystyk oraz ich wyniki

odpowiednio zestawić. Idea tego została pokazana na rys. 3.7. Dla zobrazowania rozkładu BZT-RT w przestrzeni z i czasie t , należy uwzględnić warunki graniczne reprezentowane przez:

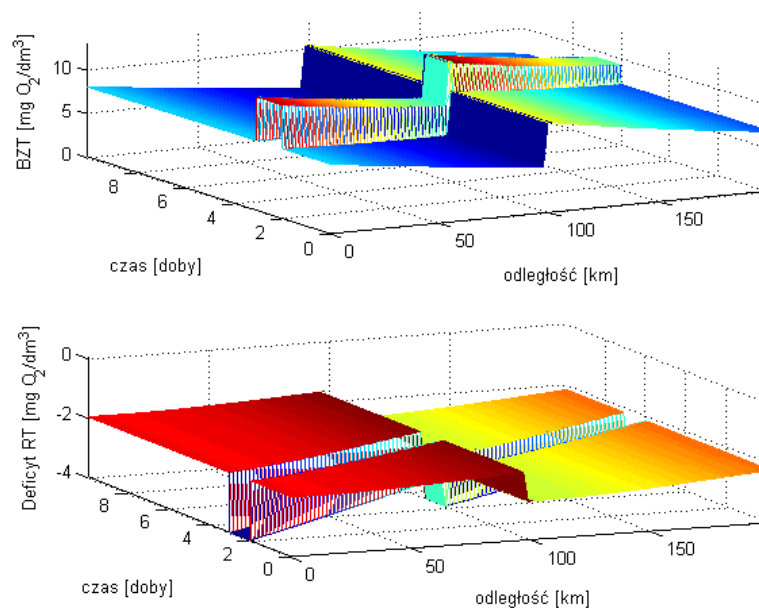
- *warunek brzegowy* – wartość x na początku rozważanego odcinka w dziedzinie czasu,
- *warunek początkowy* – wartość x na całej długości odcinka w chwili początkowej $t = t_0$.

Wynikiem przeprowadzonych badań symulacji dla wielu charakterystyk uzyskano hiperpowierzchnię przedstawioną na rys. 3.11 [26]. Każdy punkt tej powierzchni reprezentuje wartość BZT i deficytu RT. Rys. 3.11 uwzględnia występowanie dopływu bocznego, w którym występują stałe duże wartości BZT i RT tak jak na początku rzeki.



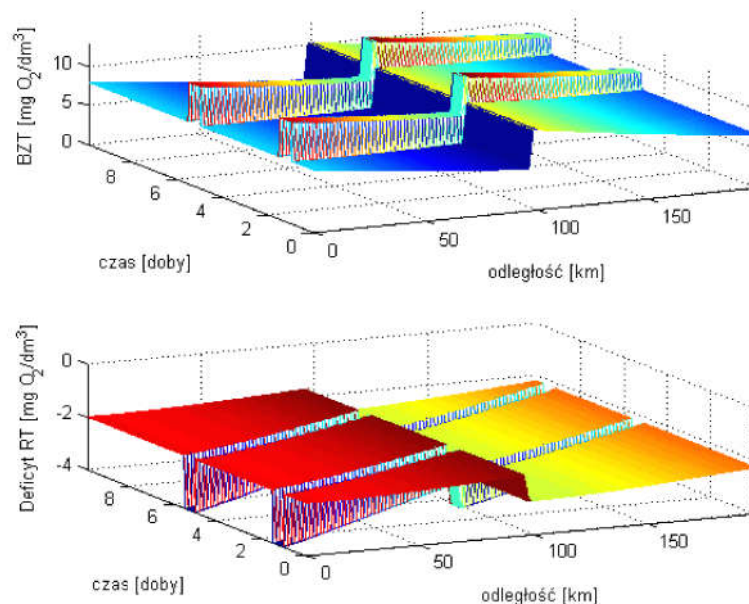
Rys. 3.11 Przestrzenno – czasowy rozkład wartości stężeń BZT i RT

Na rys.3.12 przedstawiono sytuację podobną jak poprzednio, ale ponadto na początku rzeki wystąpiło nagłe zwiększenie BZT i deficytu RT trwające 1 dobę. Może to być objawem chwilowej awarii oczyszczalni ścieków. Efektem zmiany kształtów powierzchni widoczny jest na całej długości w postaci „korytarza”, a jego ułożenie zależy od nurtu przepływającej wody, czyli charakterystyki.



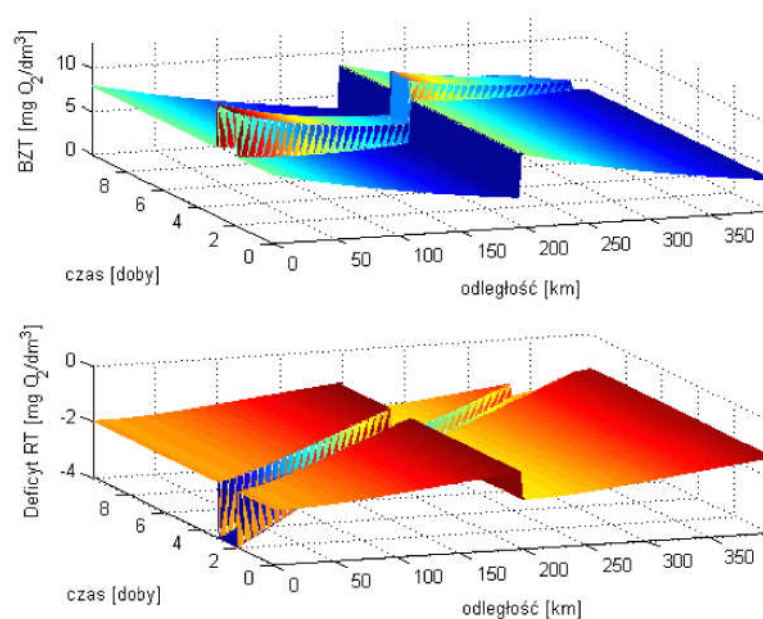
Rys. 3.12 Przestrzenno – czasowy rozkład BZT i RT dla zmiennych warunków brzegowych przy prędkości rzeki $V=20$ [km/doba]

Kolejny przypadek prezentowany na rys. 3.13 może dotyczyć występowania nagłych dwóch awarii oczyszczalni ścieków lub gwałtownych opadów trwających np.: 1 dobę.

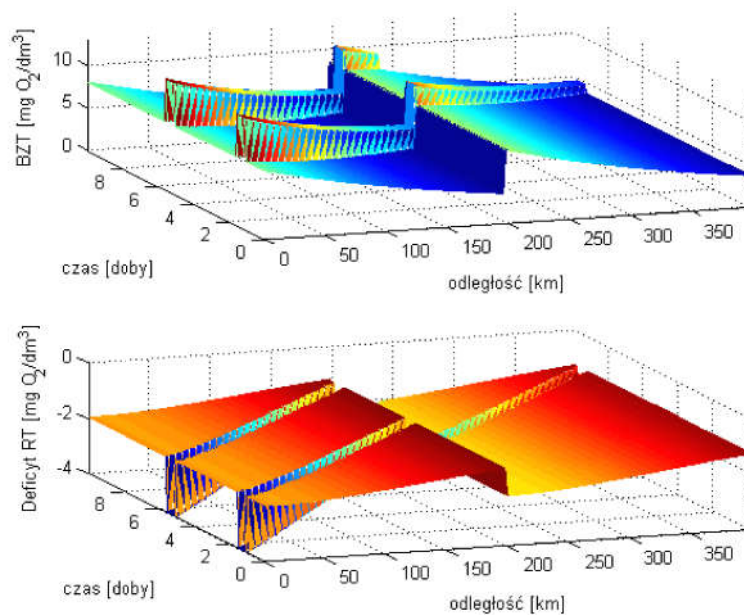


Rys. 3.13 Przestrzenno – czasowy rozkład BZT, RT z dopływem bocznym dla zmiennych warunków brzegowych oraz z prędkością $V=20$ [km/doba]

Większa prędkość przepływu rzeki wpływa na położenie „przekątnej” w układzie odniesienia czas – długość. Wzrost prędkości przepływu rzeki zmienia kąt nachylenia charakterystyki względem osi czasu (porównaj rys. 3.12, 3.13 oraz rys.3.14 i 3.15).

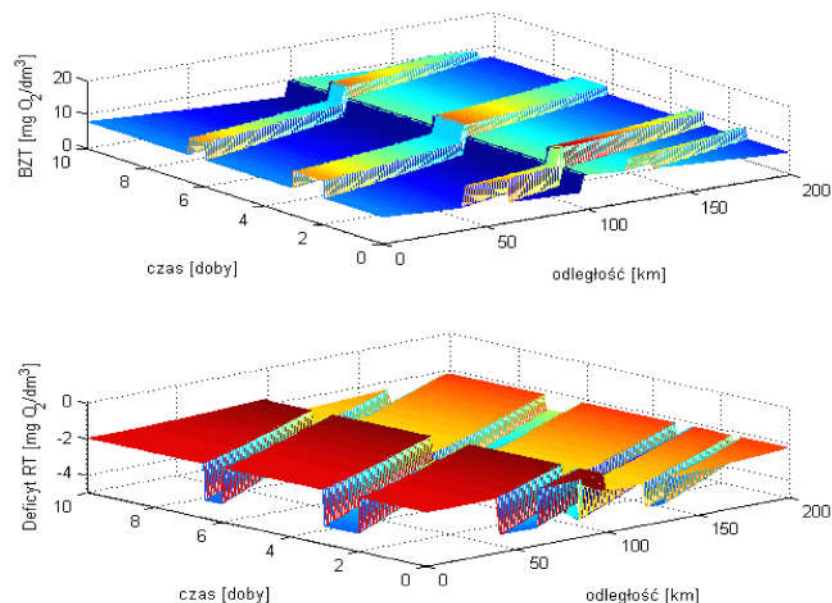


Rys. 3.14 Charakterystyki BZT, RT z jedną „awarią” dla $V=40$ [km/doba]



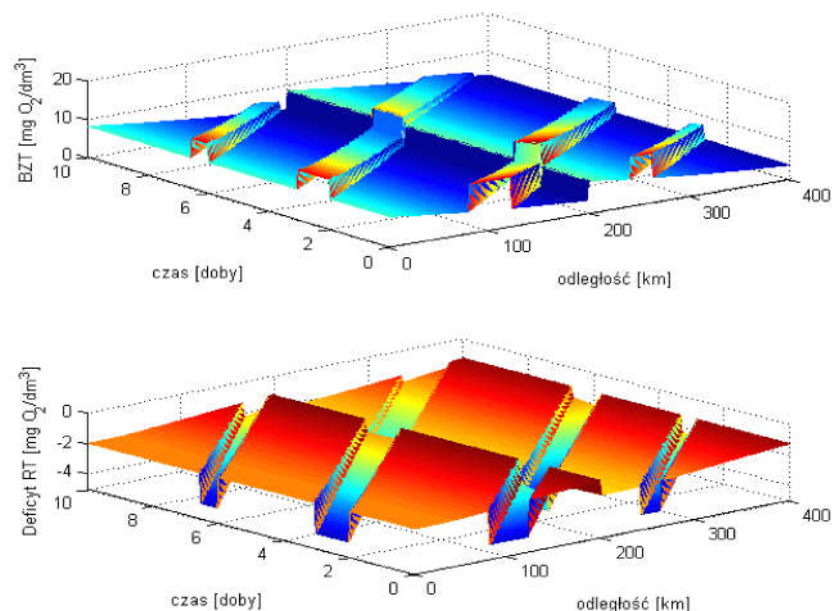
Rys. 3.15 Przestrzenny rozkład BZT, RT z dwoma „awariami” i $V=40$ [km/doba]

Rozważając zagadnienie modelowania zanieczyszczeń w rzece ze zmiennymi warunkami brzegowymi możemy także uwzględnić występowanie dopływów wzdłuż całej długości rzeki. Pojawienie się dopływów może być spowodowane np. wystąpieniem naturalnego dopływu do rzeki spowodowanego opadami lub zrzutem ścieków. Interpretacja takiego zjawiska prezentuje rys. 3.16.



Rys. 3.16 Powierzchnie BZT i RT dla zmiennych warunków brzegowych przy $V=20$ [km/doba]

Dokonując porównania rys. 3.15 i 3.16, można zauważyć różne długości charakterystyk w rozważanej domenie czasowo-przestrzennej. Porównując rezultaty badań symulacyjnych z różnymi prędkościami okazuje się, że większe wartości prędkości SA przyczyną większych stężeń BZT i deficytu RT. Spowodowane jest to krótszym czasem „pobytu” w rozważanej domenie rozwiązań (z, t) i krócej oczyszczają się



Rys. 3.17 Przestrzenny rozkład BZT, RT dla zmiennych warunków brzegowych dla $V=40$ [km/doba]

3.3.1 Modele o parametrach rozłożonych

Rozważając bilans masowy zanieczyszczonej wody z uwzględnieniem długości rzeki równania Streetera – Phelps (równania 3.1-3.4) przekształcają się na równania różniczkowe cząstkowe hiperboliczne pierwszego rzędu. Model matematyczny BZT - RT dla określonej długości traktowany jako i -ty odcinek rzeki przyjmuje postać [35], [36]:

$$\frac{\partial}{\partial t} x_i(z, t) + \frac{\partial}{\partial z} V x_i(z, t) = A x_i(z, t) + B w_r(z, t) \quad (3.6 a)$$

z warunkami granicznymi:

$$x(0, t), x(z, t_0), \quad (3.6 b)$$

gdzie:

$x(z, t) = \text{col}[x_1 \ x_2]$ wektor reprezentujący odpowiednio BZT oraz deficytu RT,

$w_r = \text{col}[w_{r1} \ w_{r2}]$ - wektor wymuszeń reprezentujący zakłócenia o charakterze rozłożonym, wynikających z lokalnych źródeł tlenu z fotosyntezy, zużycia tlenu przez osady dennie czy BZT i RT małych dopływów [35].

$V = \begin{bmatrix} v & 0 \\ 0 & v \end{bmatrix}$ - macierz diagonalna z prędkościami przepływu wody v ,

$A = \begin{bmatrix} -k_1 & 0 \\ -k_2 & -k_3 \end{bmatrix}$ - macierz stanu,

$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ - macierz oddziaływań zakłóceń,

Należy zauważyć, iż diagonalność macierzy prędkości przepływu V odzwierciedla szeregowy charakter obiektów tego typu, w których wektor stanu „wędruje” tylko w jednym kierunku z jednakową prędkością.

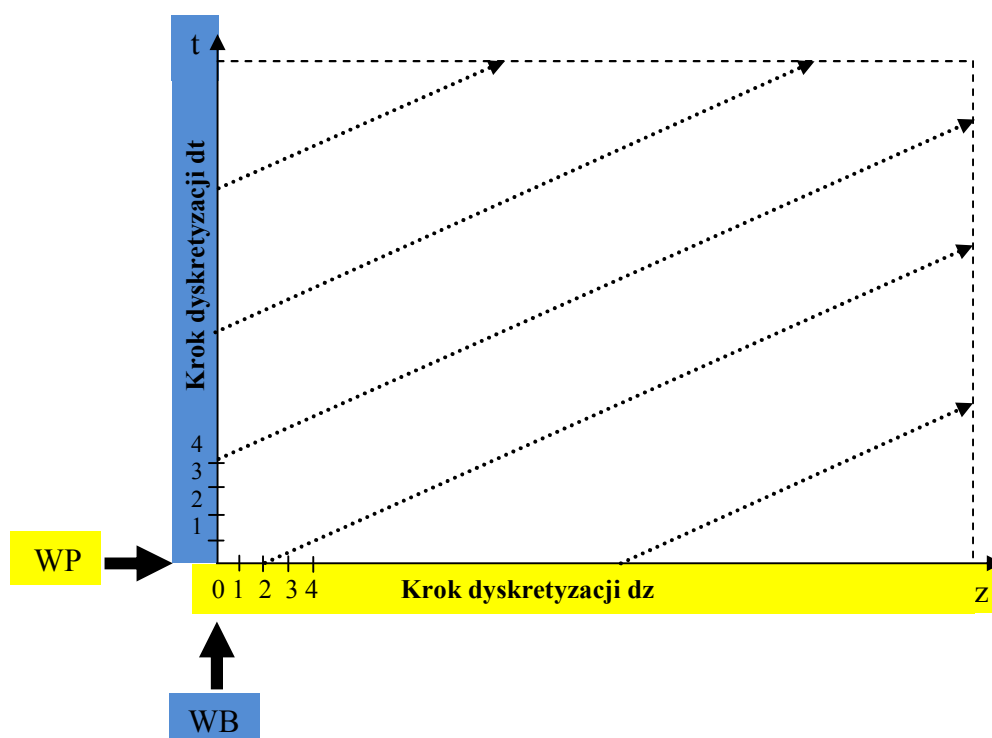
Warunki graniczne uwzględnione w modelu opisane są następującymi warunkami początkowymi oraz brzegowymi.

Warunek początkowy (WP) – dotyczy całej długości z odcinka w chwili $t=t_0$

$$x_i(z, t_0) = x_{i0}(z) \quad (3.7)$$

Warunek brzegowy (WB) dotyczy początku rozważanego odcinka w dziedzinie czasu:

$$x_i(0, t) = M_i x_{i-1}(1, t) + w_{bi}(t) + R_{bi} u_{bi}(t) \quad (3.8)$$

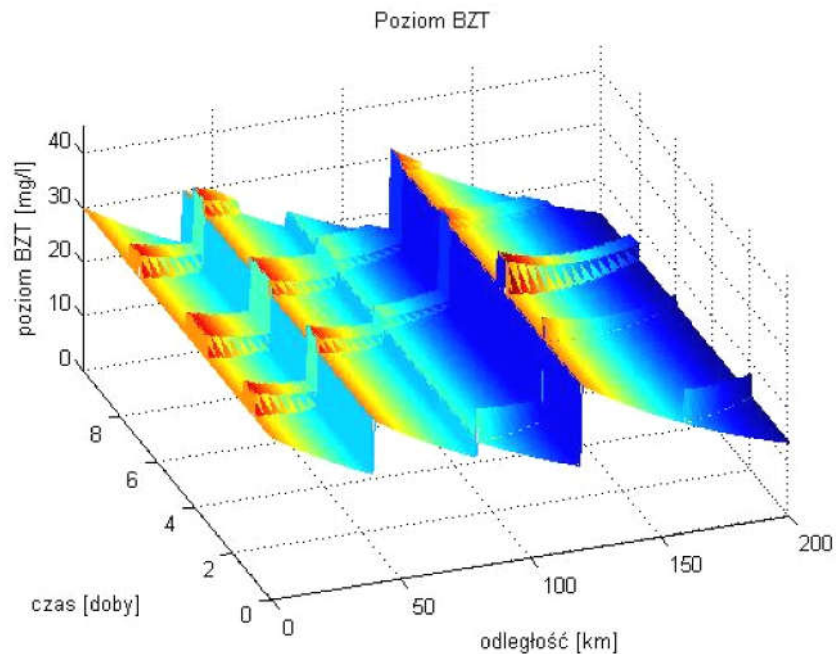


Rys.3.18 Lokalizacja warunków granicznych modelu zanieczyszczonej biochemicznie rzeki oraz charakterystyki

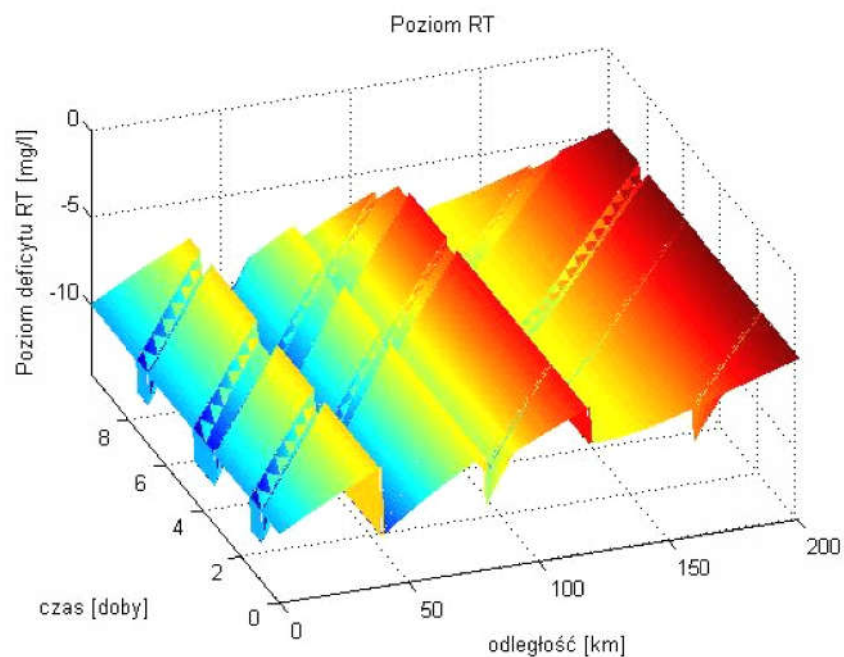
Sterowanie u_{bi} oddziałuje tylko na współrzędną wektora stanu x_2 i zlokalizowane jest na początku odcinka rzeki. Macierz M_i w zależności (3.8) stanowi powiązania brzegowe między sąsiednimi odcinkami, wektor w_{bi} reprezentuje zakłócenia brzegowe. W zależności (3.8) występuje jedynie powiązanie między odcinkami rzeki. Ponadto stanowi ono strukturę szeregową dla modelu całej rzeki umownie podzielonej na podobiekty (zob. rys. 3.6)

Rozwiązanie modelu matematycznego (3.6, a, b) generuje bezpośrednio wartości BZT i deficyt RT zależne od długości i czasu. Stanowi ogólniejsze podejście w stosunku do rozważań równań Steetera- Phelps'a na charakterystykach. Dysponując rzeczywistymi wartościami prędkości rzeki (w ogólności zależne od długości) można otrzymać rozkłady BZT-RT [35] [36]. W rozprawie zaprezentowano tylko wybrane rezultaty badań symulacyjnych.

W wyniku tych symulacji otrzymano hiperpowierzchnie, które w dużym stopniu mogą odtwarzać warunki w rzeczywistej rzece. W badaniach uwzględniono kilka dopływów bocznych o różnych wartościach wskaźników BZT i RT oraz zmienne w czasie i na długości warunki graniczne [42].

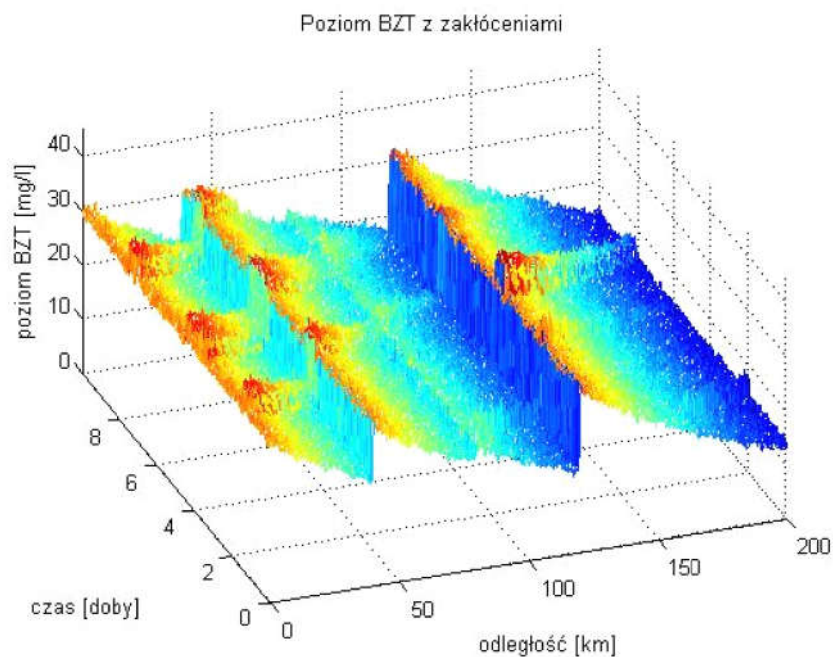


Rys.3.19 Rozkład poziomego BZT uwzględniający różne warunki graniczne oraz dopływy boczne (dla $w_{r1} = 0$)

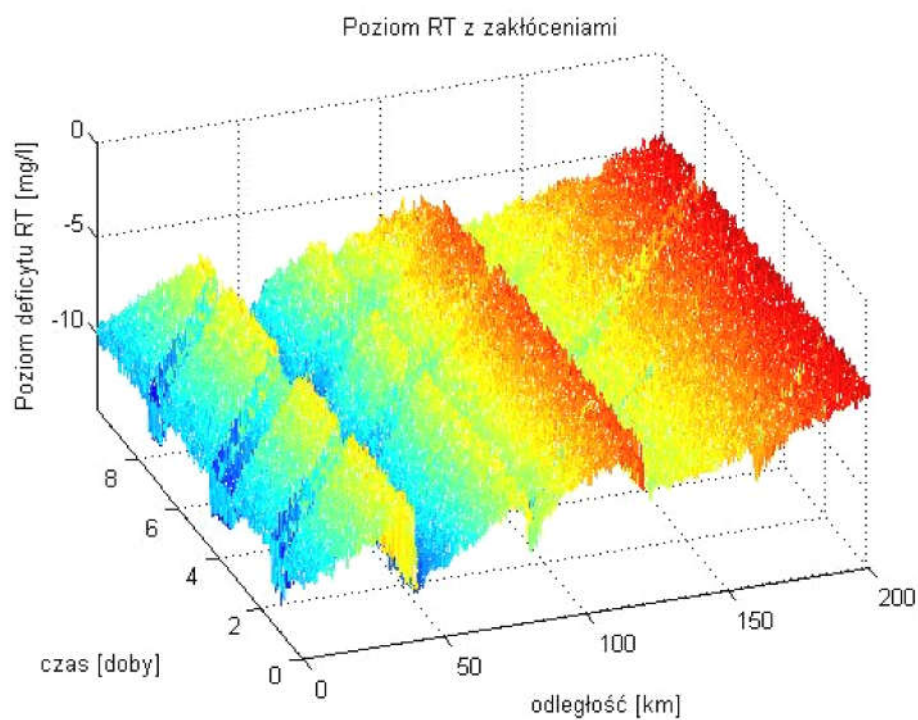


Rys.3.20 Rozkład deficytu RT uwzględniający różne warunki graniczne oraz dopływy boczne (dla $w_{r1} = 0$)

Rysunki 3.19 i 3.20, przedstawiają rozkład BZT-RT dla rzeki z kilkoma dopływami. Otrzymane hiperpowierzchnie są „gładkie”, co jest wynikiem przyjęcia zerowych wymuszeń w_r (rów. 3.6a). Ten mało realny przypadek zmieniono dodając zaszumienie sygnałem stochastycznym o rozkładzie gaussowskim. Oznacza to, że we wzorze (3.6a) nie przyjmują wartości zerowych

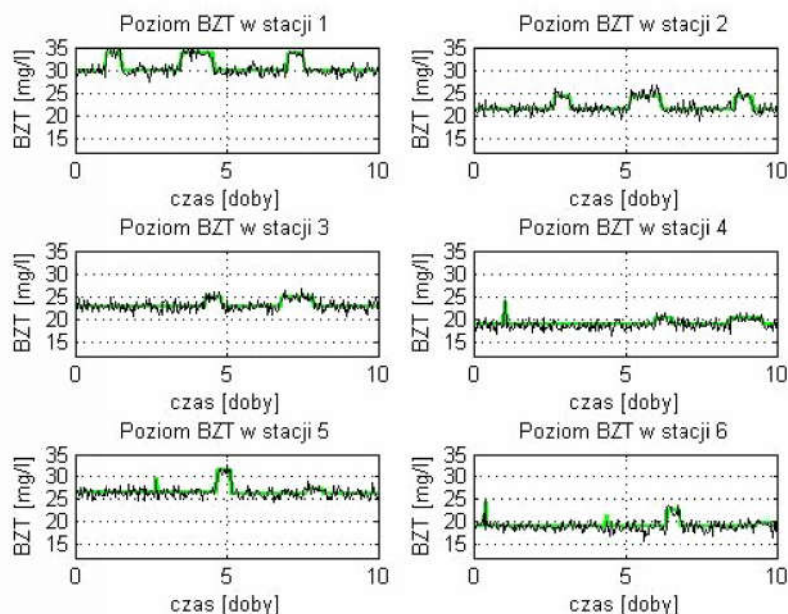


Rys.3.21 Rozkład przestrzenno-czasowy poziomu BZT z zaszumionymi warunkami granicznymi

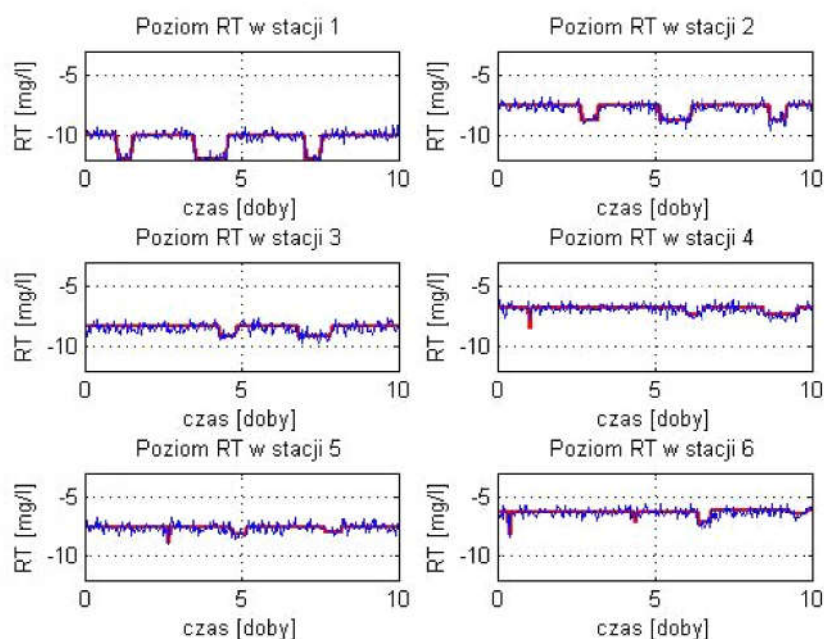


Rys.3.22 Rozkład przestrzenno-czasowy poziomu RT z zaszumionymi warunkami granicznymi

Na podstawie rezultatów przedstawionych na rys. 3.21 i 3.22 można otrzymać przebiegi rozkładu BZT-RT w ustalonych miejscach rzeki, np. (co 40 km i w czasie 10-ciu dni). Efektem takiej interpretacji przedstawiają rys. 3.23 dla BZT oraz rys. 3.24 dla deficytu RT.

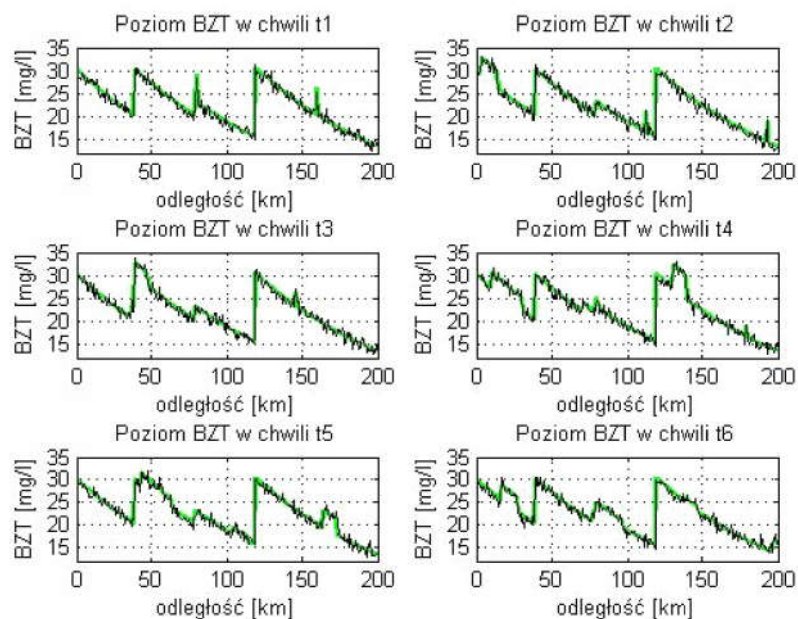


Rys.3.23 Wartości BZT w stacjach pomiarowych z oraz bez zaszumienia

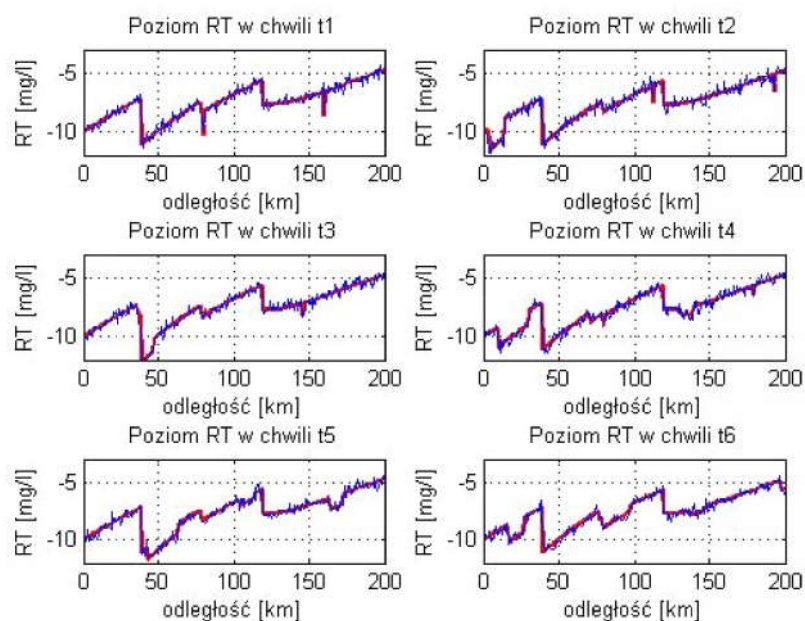


Rys.3.24 Deficyt RT w stacjach pomiarowych z oraz bez zaszumienia

Innym możliwym podejściem w interpretacji wyników jest obserwacja rozkładu BZT-RT w określonych chwilach czasowych np. od t_1 do t_6 na przestrzeni całej długości rzeki. Uzyskane rezultaty przedstawia na rys. 3.25 oraz rys.3.26. Jednak warto wspomnieć, iż nie jest to praktycznie wykonalne, gdyż rzeka na całej długości musiała by być zaopatrzona w urządzenia pomiarowe w celu odtworzenia wartości BZT-RT.

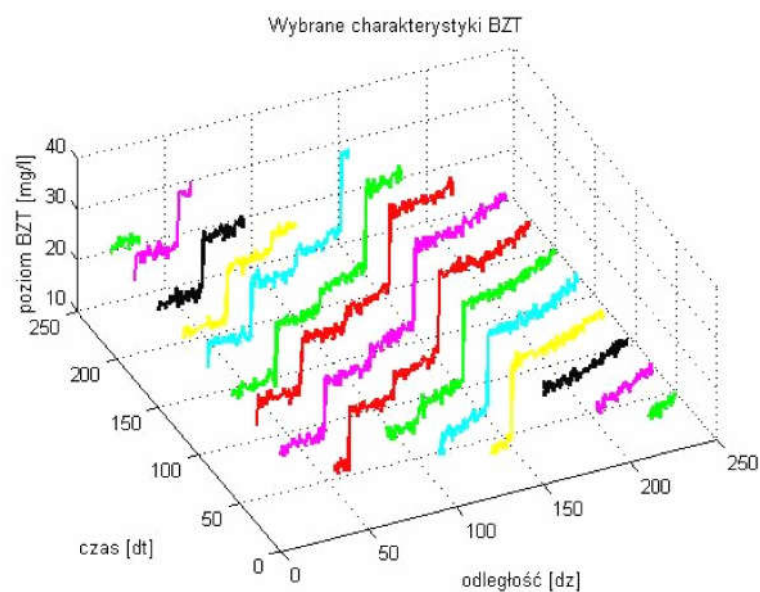


Rys.3.25 Rozkład BZT w wybranych chwilach t_1 - t_6 z oraz bez zaszumienia

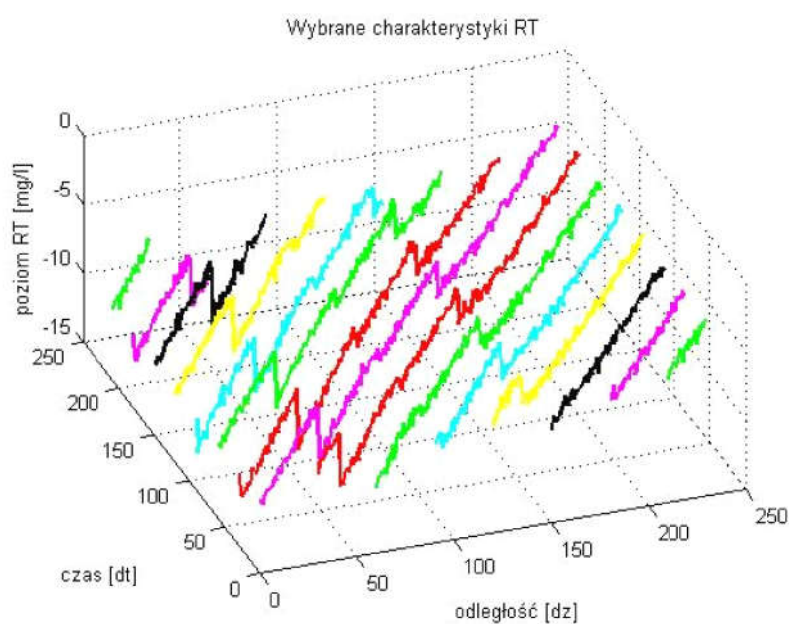


Rys.3.26 Rozkład deficytu RT w wybranych chwilach t_1 - t_6 z oraz bez zaszumienia

Jeżeli dokonywalibyśmy pomiarów ciągłych dla tej samej partii wody przemieszczającej się w rzece, otrzymalibyśmy rozkładu BZT-RT na charakterystyce. Prowadząc takie rozważania rozpoczynające się na brzegach domeny rozwiązań otrzymuje się wiele charakterystyk. Ich lokalizacje i wartości rozkładów BZT-RT przedstawiają rys. 3.27 oraz rys. 3.28.



Rys.3.27 Rozkład BZT na wybranych charakterystykach z uwzględnieniem zaszumienia



Rys.3.28. Rozkład RT na wybranych charakterystykach z uwzględnieniem zaszumienia

Uzyskanie takich wyników jest efektem obserwacji wskaźników jakości wody wokół swobodnie płynącej łodzi.

3.3.2 Równania różniczkowe zwyczajne „wzdłuż charakterystyk”

Rozwiązaniem równań różniczkowych cząstkowych opisujących model matematyczny zanieczyszczonej rzeki jest funkcja współrzędnych wektora stanu x zależna od czasu i długości. Pozwala ona określić wartości stężeń BZT i deficytu RT dla dowolnej współrzędnej długości i czasu w zakresie rozważanej domeny. Uwzględniając naturalny przepływ rzeki, zaproponować można sposób interpretacji procesu oczyszczania rzeki, wzdłuż charakterystyk, a przykładem może być „obserwacja” stanu płynącej wody $x(z,t)$ wokół łodzi bez napędu.

Opis zanieczyszczonej rzeki przy pomocy charakterystyki sprowadza się do równania różniczkowego zwyczajnego. Dla rozważań obejmujących określone dane tj. $t \in (0, t_k)$, $z \in (0 \dots z_k)$ należy uwzględnić wiele takich charakterystyk (zob. rys. 3.7). Zatem równoważny opis równaniami różniczkowymi cząstkowymi sprowadza się do licznego zbioru równań różniczkowych zwyczajnych obejmujących rozważany obszar przestrzenno-czasowy. Ponadto w przypadku umownego podziału rzeki otrzymuje się zbiór równoległych charakterystyk w odcinku, ale o różnym nachyleniu w poszczególnych odcinkach [38].

Dla i -tego odcinka rzeki charakterystyki zdefiniowane są zależnością:

$$\frac{d}{dt}z_i(t) = v_i(z_i(t)) \quad (3.9)$$

których punkty brzegowe spełniają warunek:

$$\int_{t_{0,i}}^{t_{0,i+1}} v_i(z_i(t)) dt + z_{0i} = 1 \quad (3.10)$$

gdzie $z_{0i} \in [0, 1]$ jest współrzędną w początkowym momencie t_{0i} .

Dla tej samej charakterystyki, moment $t_{0,i+1}$ określa jej początek w $i+1$ -szym odcinku. Zbiór takich odcinków linii pokrywa cały obszar przestrzenno-czasowy [40].

Realizację ciągłych w czasie pomiarów można przeprowadzać w ustalonych punktach wzdłuż rzeki np. w pobliżu mostów czy innych budowli wodnych. Przy rozważaniach uwzględniających interpretację wzdłuż charakterystyk przypadek ciągłych w czasie pomiarów odpowiada sytuacji, gdy czujnik mierzy np. z łodzi swobodnie płynącej nurtem rzeki. Jest oczywiste, że takich pomiarów nie stosuje się na szeroką skalę. Jeśli rozważymy wariant z pomiarami zlokalizowanymi w ustalonych punktach rzeki to wówczas

swobodnie płynąca łódka napotyka te pomiary w dyskretnych momentach dla danej charakterystyki. Pomiary ciągłe można generować z równania:

$$y(t) = x_2(t) + v_p(t) \quad (3.11)$$

w którym $x_2(t)$ – to rozpuszczony tlen RT, $v_p(t)$ – jest zakłóceniem pomiarowym o rozkładzie gaussowskim, o zerowych wartościach średnich. Za pomocą podstawienia $t=t_k$, $k=1,2,3,\dots$ uzyskuje się równania dyskretne, których postać wektorowa jest następująca [7], [29]:

$$y(t_k) = Cx(t_k) + v_p(t_k) \quad (3.12)$$

gdzie macierz $C=[0 \ 1]$, a wektor stanu $x(t_k)=col[x_1(t_k) \ x_2(t_k)]$ i zakłócenie pomiarowe $v_p(t_k)$ określone są w dyskretnym momencie t_k .

Stan zanieczyszczonej rzeki opisany równaniami cząstkowymi da się opisać równaniami różniczkowymi zwyczajnymi przyjmującymi postać:

$$\frac{d}{dt}x(z_i(t),t) = A(z_i(t))x(z_i(t),t) + Bw_r(z_i(t),t) \quad (3.13)$$

gdzie warunek początkowy określany jest następująco:

$$x(z_i(t_0),t_0) = x_0(z_{i0}), \quad i=1,2,3,\dots$$

a macierze A i B – to odpowiednio macierz stanu, macierz oddziaływań zakłóceń, zaś w_r jest sygnałem szumu zakłócającego.

Dla tak określonego obiektu, opisanego równaniami (3.13) oraz pomiarami (3.11), sformułowano problem estymacji [36] [43].

3.4 Analityczne rozwiązanie równań różniczkowych zwyczajnych dla zanieczyszczonej wody w rzece

Najbardziej zadowalającym rozwiązaniem równań różniczkowych opisujących model zanieczyszczonej rzeki jest rozwiązanie analityczne. Jednak nie zawsze jest to możliwe jak w większości praktycznych przypadków wówczas zachodzi konieczność posłużenia się rozwiązaniem przybliżonym. Współcześnie rozwiązania analityczne wykorzystuje się do sprawdzania, jakości metody numerycznej użytej do rozwiązania przybliżonego [31].

Rozważamy równanie różniczkowe liniowe rzędu pierwszego, którego wzór ogólny jest postaci:

$$y' + p(x)y = f(x) \quad (3.14)$$

gdzie $p(x)$ i $f(x)$ są funkcjami ciągłymi na przedziale (a, b) , i funkcja f nie jest tożsamościowo równa zeru na rozważanym przedziale. Wówczas nazywamy je równaniem niejednorodnym (RN).

Rozwiązywanie równania niejednorodnego należy realizować w dwóch etapach. W pierwszym rozwiązuje się odpowiadające mu równanie jednorodne (tzn. równanie, które otrzymujemy podstawiając $f(x) = 0$). Stosuje się w tym celu metodę rozdzielania zmiennych bądź korzysta ze wzoru określającego całkę ogólną równania liniowego jednorodnego. W etapie drugim stosuje się dwie możliwe metody: uzmiennienia stałej lub metodę przewidywań. W naszych rozważaniach wykorzystano metodę uzmiennienia stałej, która opiera się na całce ogólnej równania jednorodnego (CORJ), postaci [29]:

$$y = Ce^{-P(x)} \quad (3.15)$$

gdzie: $P(x)$ jest ustaloną funkcją pierwotną funkcji $p(x)$.

Całka ogólna równania niejednorodnego (CORN) wyraża się podobnym wzorem z tą różnicą, że zamiast stałej C występuje w nim pewna funkcja zmiennej x . Aby ją znaleźć, dokonuje się uzmiennienia stałej, czyli zastąpienia stałej C nieznaną funkcją, oznaczaną przez $C(x)$, a następnie dobiera się ją tak, by wzór:

$$y = C(x)e^{-P(x)}, \quad (3.16)$$

definiował rozwiązanie ogólne równania niejednorodnego.

W naszym przypadku będziemy poszukiwać rozwiązania dla równania Streetera – Phelps (dla BZT):

$$\frac{d}{dt}x_1 = k_1x_1 + w_1, \quad (3.17)$$

z warunkiem początkowym $x_1(0) = x_0$.

gdzie: x_1 - Biochemiczne Zapotrzebowanie Tlenu (BZT) $\left[\frac{mg}{l}\right]$

k_1 - współczynnik szybkości reakcji $\left[\frac{1}{doba}\right]$

w_1 - intensywność dopływu zanieczyszczeń $\left[\frac{mg}{l\ doba}\right]$

Rozwiązaniem równania różniczkowego jednorodnego jest:

$$x_1(t) = C_1e^{-k_1t} \quad (3.18)$$

Posługując się wspomnianą wcześniej metoda uzmienniania stałych otrzymujemy:

$$x_1(t) = C_1(t) e^{-k_1t} \quad (3.19)$$

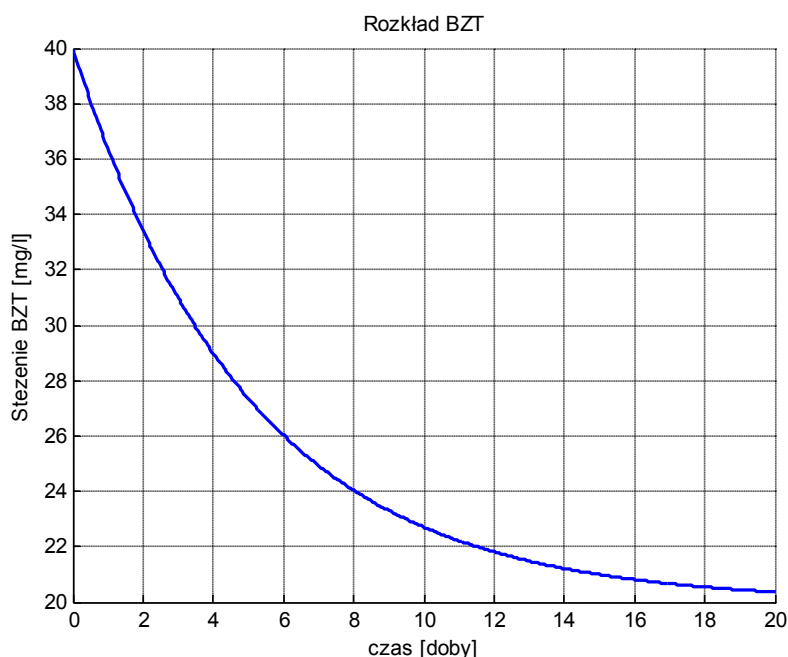
Dokonując różniczkowania równania (3.19) oraz podstawiając równanie (3.17 i 3.18) otrzymujemy:

$$x_1(t) = C_1 e^{-k_1 t} + \frac{w_1}{k_1} \quad (3.20)$$

Uwzględniając warunek początkowy $x_1(0) = x_0$, z równania (3.20), wyznaczamy stałą C_1 i wstawiamy ponownie do równania (3.20) otrzymując rozwiązanie równania (3.17).

$$x_1(t) = x_0 e^{-k_1 t} + \frac{w_1}{k_1} [1 - e^{-k_1 t}] \quad (3.21)$$

Na rysunku rys. 3.29 została przedstawiona interpretacja graficzna rozwiązania (3.21).



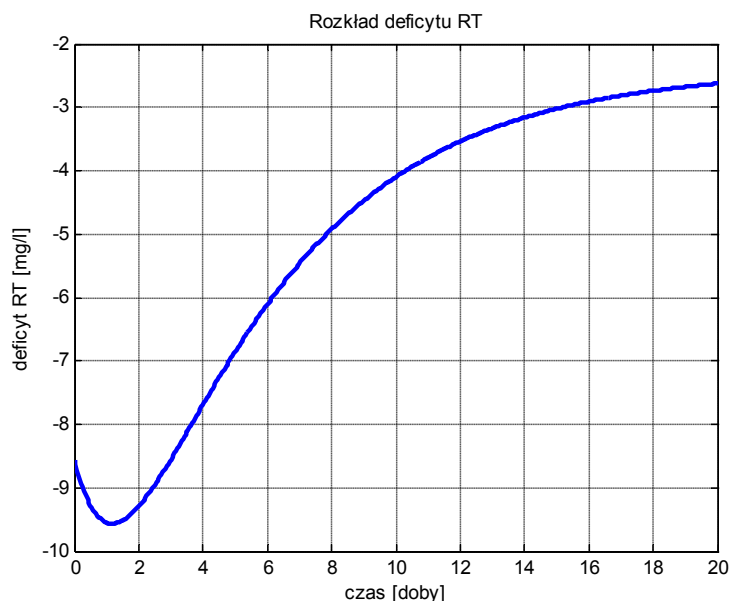
Rys. 3. 29 Rozkład BZT wyznaczony metoda analityczną dla $x_{1_0} = 40, w_1 = 4$

Postępując analogicznie jak w przypadku rozwiązania równania (3.17), poszukujemy rozwiązania dla równania (3.4). Przyjmuje ono postać:

$$x_2(t) = \frac{k_2}{k_1 + k_3} x_1 e^{-k_1 t} + \frac{k_2 w_1}{k_1 (k_1 + k_3)} e^{-k_1 t} - \frac{1}{k_3} \left(\frac{k_2}{k_1} w_1 - a \right) + x_2 e^{-k_1 t} + A_z e^{-k_1 t}, \quad (3.22)$$

gdzie A_z opisujemy następująco:

$$A_z = \frac{k_2}{k_1 + k_3} \left(x_1 - \frac{w_1}{k_1} \right) - \frac{1}{k_3} \left(\frac{k_2}{k_1} w_1 - a \right) \quad (3.23)$$



Rys. 3.30 Rozkład deficytu RT wyznaczony metoda analityczną

$$\text{dla } x_{1_0} = 40, x_{2_0} = 8,5 \quad w_1 = 4$$

Na rys. 3.30 zaprezentowano graficzne rozwiązanie rozwiązania (3.22) z minimum RT występującym po czasie około 1 doby.

3.5 Dyskretne rozwiązanie równań różniczkowych modelu

Rozwiązania komputerowe równań różniczkowych zawsze występują w postaci dyskretnej. Istnieje wiele metod pozwalających uzyskać pożądane rozwiązania. Metody rozwiązań równań różniczkowych opisywanych w tym i kolejnym podrozdziale należą do grupy metod różnicowych, które możemy podzielić na schematy jednokrokowe i wielokrokowe. Rozważane metody należą do rodziny schematów jednokrokowych jawnych, w których występują równania liniowe. Takie algorytmy są pożyteczne w sytuacji, gdy znany jest warunek początkowy $x(t_0) = x_0$, który potrzebny jest do zainicjowania obliczeń [56].

Metoda Eulera

Do skonstruowania metody odwoływano się do szeregu Taylora:

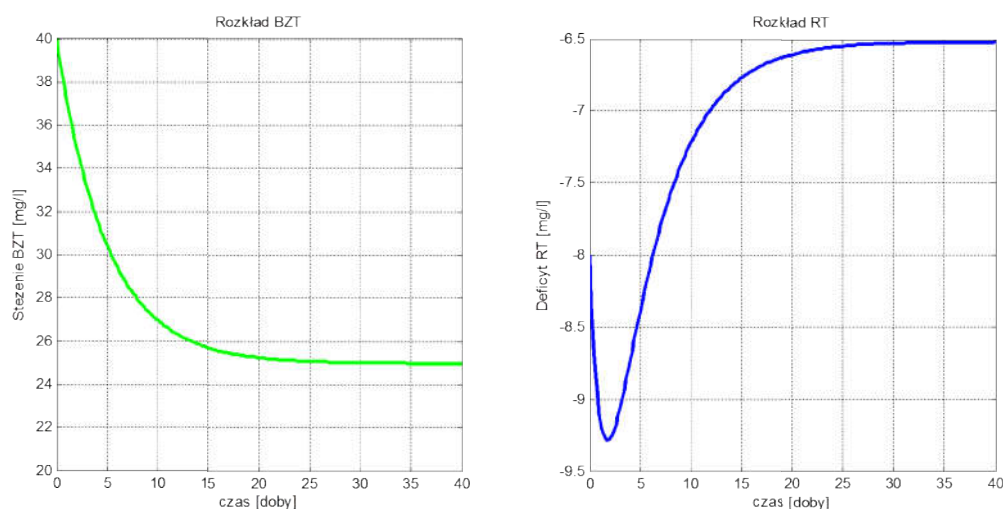
$$x(t + h) = x(t) + h x^{(1)}(t) + \frac{h^2}{2} x^{(2)}(t) + O(h^3) = x(t) + h f(t, x(t)) + O(h^2), \quad (3.24)$$

gdzie: $x^{(j)}$ oznacza j -tą pochodną $x(t)$, $O(h^2)$ - błąd obcięcia.

Przyjmując $t = t_k$ oraz zakładając, że w punkcie t_k wartość $x_k = x(t_k)$ dobrze aproksymuje, to pomijając wyrazy rzędu h^2 , otrzymujemy:

$$x_{k+1} = x_k + f_k \quad (3.25)$$

Wzór (3.25), w którym, za h przyjmujemy długość kroku, nazywamy **metodą Eulera**.



Rys. 3.31 Rozkład BZT i RT wyznaczony metodą Eulera

Wykorzystując powyższą jednokrokową metodę do obliczenia zagadnień modelowania zanieczyszczonej wody w rzece opisanych równaniami różniczkowymi otrzymujemy następujące wyniki przedstawione na rys.3.31, dla $x_{1_0} = 40, x_{2_0} = 8, w_1 = 4$.

Metoda Rungego – Kutty

Kolejnym schematem, który zastosowano jest algorytm Rungego - Kutty. Jest to metoda numeryczna do iteracyjnego rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych, opracowana około 1900 roku. Istnieje wiele odmian metody *R-K*, jednakże algorytm czwartego rzędu jest najpowszechniej stosowany. Wyróżnia go prosta implementacja, duża szybkość obliczeniowa oraz wysoki rząd metody. Schemat typu Rungego - Kutty stosuje się powszechnie do rozwiązania poprawnie postawionych zagadnień początkowych [56].

Z przeprowadzonych badań wynika, iż dokładność rozwiązania jest porównywalna jak w metodzie Eulera.

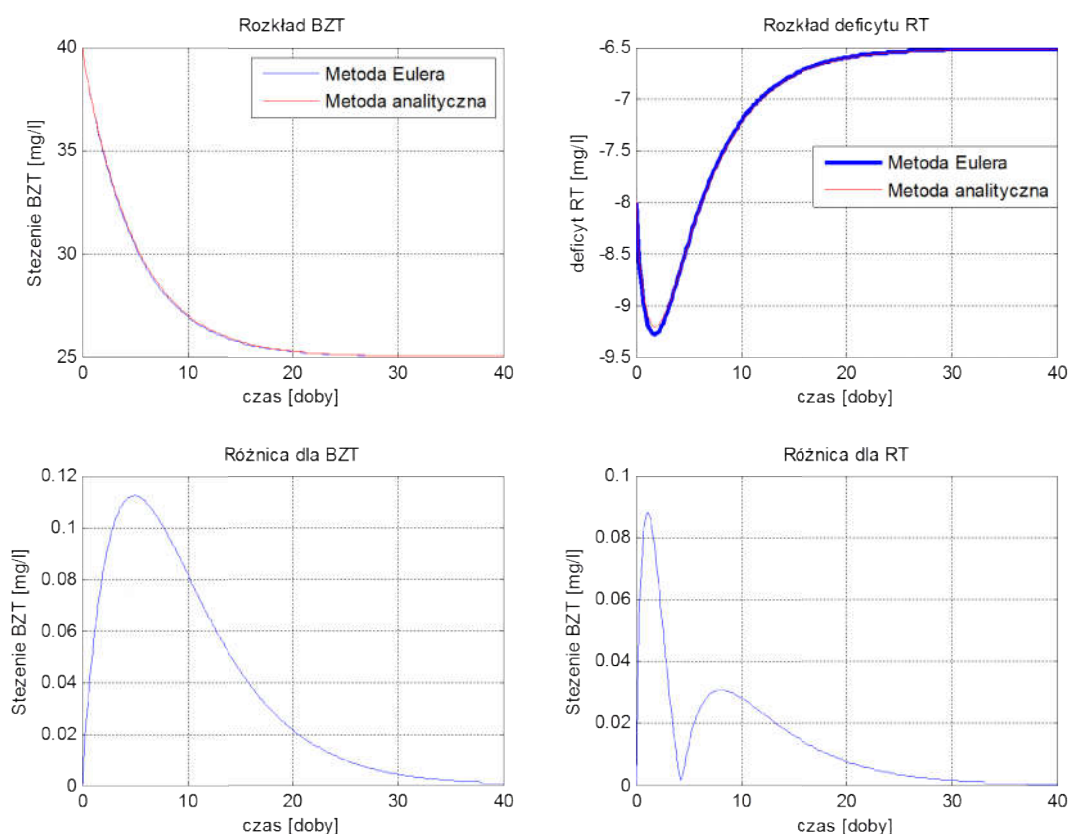
Porównanie metod rozwiązań równań różniczkowych biochemicznie zanieczyszczonej wody

Dokładność rozwiązania równań różniczkowych dla biochemicznie zanieczyszczonej wody metodami przybliżonymi wyznaczono porównując wyniki z rozwiązaniem dokładnym określonym ze wzorów analitycznych. W dalszych rozważaniach będziemy korzystać z przybliżonego rozwiązania, które uzyskuje się przy niewielkich nakładach obliczeniowych [66].

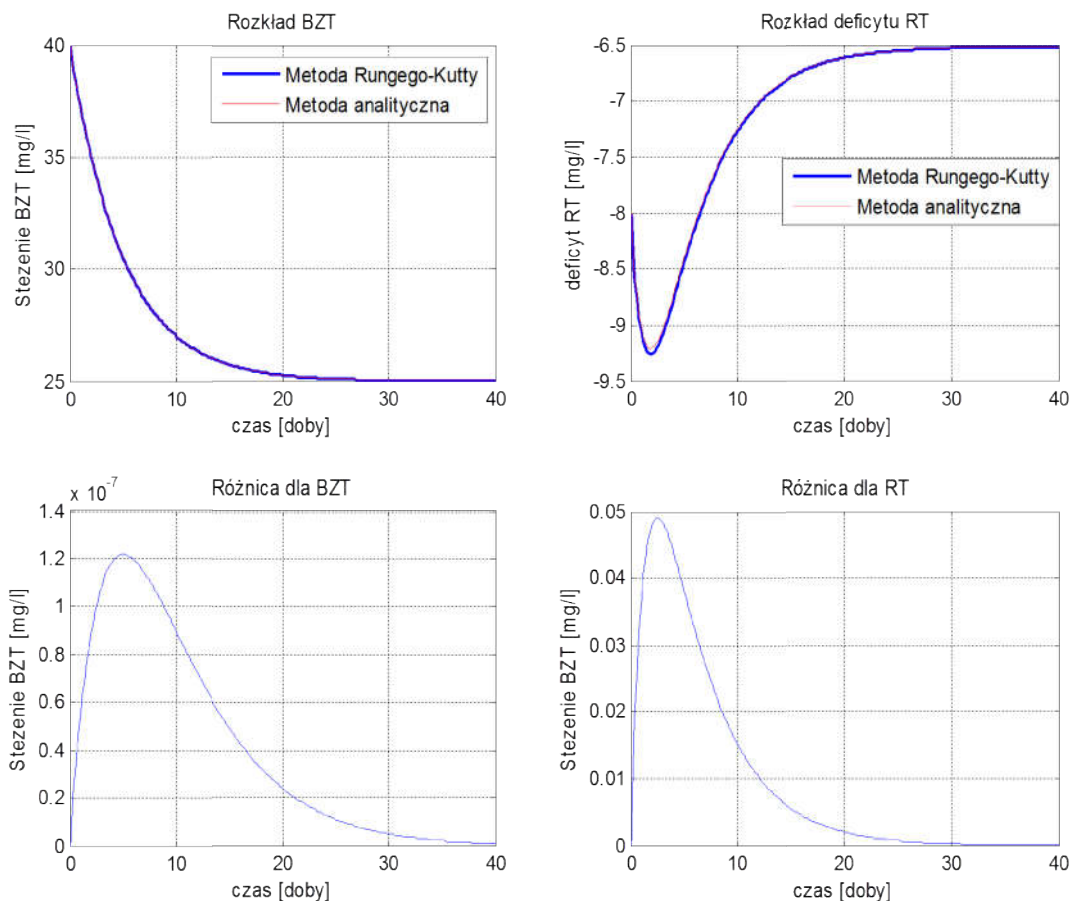
Dla równań (3.1 i 3.2) zastosowano zarówno metodę Eulera jak i Rungego – Kutty.

Porównując metody numeryczne należy uwzględnić kilka czynników. Zaliczają się do nich: poziom błędów zaokrągleń wynikający z arytmetyki zmiennoprzecinkowej w komputerze, błędów obcięcia, na który składają się błędy lokalne – związane z pojedynczym krokiem metody, oraz błędy akumulowane – związane z nawarstwianiem się błędów z poprzednich kroków. Podczas rozwiązywania równania różniczkowego zwyczajnego numerycznie, ważne jest, by błąd nie narastał wraz z kolejnymi krokami rozwiązania. Może to spowodować niestabilność metody [31]. Dokonując obliczeń wywnioskowano, że metody jawne Eulera i Rungego-Kutty są numerycznie stabilne, jeśli krok h jest wystarczająco mały [59].

Na rysunkach (zob. rys. 3.33, 3.34) przedstawiono przebiegi sygnałów z rozwiązań przybliżonych wzorcowych w celu określenia wstępnej oceny ich dokładności.



Rys. 3.33 Rozwiązania otrzymane metodą: Eulera i analityczną dla rozkładu BZT i RT dla $dt=0.1$



Rys. 3.34 Rozwiązania metodą: Rungego - Kuty i analitycznej dla rozkładu BZT i RT dla $\Delta t=0.01$

Na podstawie zestawień z rys. 3.33 oraz rys.3.34 należy uznać, iż metoda Rungego – Kutty jest dokładniejsza. Jak można zauważyć na rysunku rys. 3.34, różnica w rozwiązaniu analitycznym i *R-K* dla równania, opisującego BZT jest rzędu 10^{-7} , a w metodzie Eulera (zob.rys. 3.33) różnice dochodzą do części dziesiątych. Równanie RT jest bardziej złożone, toteż jak pokazują otrzymane rezultaty wartości różnic w mniej dokładnej metodzie osiągają większe wartości, natomiast w metodzie Rungego – Kutty mniejsze. Dla obu metod największe wartości błędów pojawiają się w początkowej fazie obliczeń, potem ciągle maleją.

Realizacja algorytmu Rungego – Kutty, wymaga wykonania w każdym kroku czasowym obliczeń czterech wartości funkcji prawej strony równania różniczkowego $f(t_k, x_k)$, a więc funkcja ta musi być dostępna w jawnej formie. Mimo potrzeby spełnienia tych wymagań, omawiana metoda jest prosta w realizacji i zapewnia dużą dokładność rozwiązania. Dlatego jest to najczęściej stosowana metoda numeryczna w zastosowaniach inżynierskich i naukowych [28], [29].

4. Estymacja stanu obiektu filtrem Kalmana

Procesem stochastycznym $X(t)$ jest funkcja losowa zależna od czasu t . Cechą charakterystyczną funkcji procesu stochastycznego, który opisuje jego rozkład w dowolnej chwili t jest brak informacji o zależności pomiędzy wartościami procesu dla dwóch różnych chwil czasowych. Procesy gaussowskie (o rozkładzie normalnym) i Markowa są przykładami, procesów stochastycznych. W modelowaniu matematycznym przybliżenie warunków rzeczywistych tj. uwzględnienie wpływu czynników zewnętrznych stanowi trudności ich dokładnego określenia. Dlatego do modeli matematycznych wprowadza się sygnały stochastyczne reprezentujące zmienność tych sygnałów.

Funkcją losową nazywamy funkcję $X(a_1, a_2, \dots, a_m)$, która dla wszystkich wartości argumentów $a_1, a_2, \dots, a_m$ jest zmienną losową (przypadkową). W teorii regulacji automatycznej spotykamy się zwykle z funkcjami przypadkowymi jednego argumentu, którym jest czas t .

Funkcję przypadkową $X(t)$ czasu t nazywać będziemy *procesem stochastycznym*. Procesem stochastycznym $X(t)$ jest więc funkcja losowa czasu t , która dla każdej wybranej chwili czasowej jest zmienną losową. Najpełniejszą charakterystyką procesu stochastycznego jest, n -wymiarowa funkcja gęstości $f_x(x_1, x_2, \dots, x_n; t_1, t_2, \dots, t_n)$ dla n dążącego do nieskończoności.

Jednowymiarowa funkcja gęstości $f_x(x; t)$ procesu stochastycznego $X(t)$ opisuje rozkład tego procesu i jest wyczerpującą charakterystyką tego procesu, którego wartości dla różnych chwil czasowych są niezależnymi zmiennymi losowymi.

Proces stochastyczny $X(t)$ nazywamy *procesem normalnym* (gaussowskim), jeżeli n -wymiarowy wektor o składowych $X(t_1), X(t_2), \dots, X(t_n)$ dla dowolnych chwil czasowych $t_1, t_2, \dots, t_n$, i dowolnego n jest wektorem losowym o rozkładzie normalnym.

Proces stochastyczny $X(t)$ nazywamy *procesem Markowa*, jeżeli dla chwil czasowych $t_1 < t_2 < \dots < t_n$, i dowolnego $i < n$ warunkowa funkcja gęstości $f_x(x_i; t_i | x_{i-1}; t_{i-1})$ zmiennej losowej $X(t_i)$ zależy tylko od zmiennej losowej $X_{i-1} = X(t_{i-1})$, a nie zależy od zmiennych losowych $X(t_1), X(t_2), \dots, X(t_{i-2})$. Dwuwymiarowa funkcja gęstości jest wyczerpującą charakterystyką procesu Markowa.

4.1 Model Gaussa-Markowa - kryteria estymacji

Gęstość rozkładu prawdopodobieństwa warunkowego $p_{x|y}(x|y)$, jeśli wartość y jest ustalona, a x jest zmienną, zawiera pełną informację o X , wynikającą z tego, że $Y=y$. W wielu przypadkach wygodniej jest, tracąc część informacji, zadowolić się jakąś charakterystyką prostszą niż funkcja, np. przyjmując pojedynczą estymatę (ocenę) wartości X przy $Y=y$. Użyteczną okazuje się estymata o wariancji minimalnej, dla której zachodzi nierówność,

$$E\{\|X - \hat{x}\|^2 | Y = y\} \leq E\{\|X - z\|^2 | Y = y\} \quad (4.1)$$

dla wszystkich funkcji z zmiennej y , gdzie $\hat{x}$ oznacza estymatę wartości przyjmowanej przez X wiedząc, że $Y=y$.

Podstawowa właściwość estymaty o wariancji minimalnej jest zawarta w poniższym twierdzeniu.

Niech X i Y (równanie 4.1) będą wektorami losowymi o znanym rozkładzie łącznym oraz niech Y podlega pomiarom przyjmując wartość y . Niech $\hat{x}$ będzie estymata X o wariancji minimalnej. Wówczas $\hat{x}$ jest jednoznacznie wyznaczone, jako wartość średnia warunkowa X dla $Y=y$, tj.

$$\hat{x} = E[X | Y = y] = \int_{-\infty}^{+\infty} x p_{x|y}(x | y) dx \quad (4.2)$$

Twierdzenie to prowadzi do jeszcze innego określenia omawianej estymaty, którym jest estymata średnia warunkowa [2].

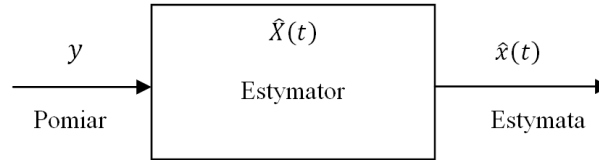
Opisane dotychczas postępowanie polegające na użyciu znanego wektora liczbowego y , do wyznaczania za pomocą gęstości rozkładu prawdopodobieństwa warunkowego, wektora liczbowego $\hat{x}$, zwanego estymatą x , jest definicją pewnej funkcji, którą oznaczamy $\hat{X}$. Dziedzina tej funkcji jest zbiór wartości y zmiennej losowej Y . Jako funkcja zmiennej losowej jest ona także zmienna losowa. Wartością, jaką przyjmuje $\hat{X}$ jest $\hat{x}$, tj.

$$\hat{X}(y) = \hat{x} = E\{X | Y = y\} \quad (4.3)$$

Wynika stąd, że

$$\hat{X} = E\{X | Y\} \quad (4.4)$$

Ponieważ nazwa „estymata” jest stosowana dla konkretnej wartości $\hat{X}$ zmiennej losowej $\hat{X}$, jaką przyjmuje ta zmienna w wyniku przyjęcia przez zmienną losową Y wartości y , dlatego $\hat{X}$ nazywa się estymatorem X uwarunkowanym zmienną Y . Na rysunku pokazano różnicę pomiędzy estymatą a estymatorem.



Rys.4.1 Estymator – funkcja lub urządzenie wyznaczające liczbę przy danym pomiarze.

Wielkość $\hat{x}$ jest estymatą nieobciążoną, gdy wartość oczekiwana warunkowa błędu, wynikająca z przyjęcia $\hat{x}$ jako estymaty X przy danym y , jest równa zero

$$E_{X|Y}\{X - \hat{x} | Y = y\} = E_{X|Y}\{X | Y = y\} - \hat{x} = 0 \quad (4.5)$$

,w którym $\hat{X}$ jest estymatorem nieobciążonym w takim sensie, że spełnia dwa warunki

$$E_{X|Y}\{X - \hat{Y}(Y) | Y = y\} = 0 \quad (4.6)$$

oraz

$$E_{X,Y}\{X - \hat{X}(Y)\} = 0 \quad (4.7)$$

W klasie estymatorów liniowych filtr Kalmana daje najmniejszą macierz kowariancji bezwarunkowej błędu. Wynika z tego, że średniokwadratowy błąd estymacji jest minimalny.

W ogólności filtr Kalmana jest algorytmem rekurencyjnym do wyznaczania estymaty wektora stanu modelu układu dynamicznego wykorzystując pomiary tego układu [61].

Algorytm bazuje na minimalizowaniu kwadratu błędu estymacji. Ponadto zakłada się, że na rozważany model oddziałują zakłócenia o charakterze stochastycznym, tzn. przyjmuje się założenie, że zarówno pomiar, jak i proces przetwarzania wewnątrz układu - modelu jest obarczony błędem o rozkładzie gaussowskim [36]. Rezultatem tego algorytmu jest estymata stanu uwzględniająca kryterium estymacji, powoduje to, iż rozwiązanie jest optymalne. W praktyce może wystąpić sytuacja, że pomiar nie obejmuje wszystkich współrzędnych wektora stanu. Oznacza to, iż do odtworzenia pełnego wektora stanu stosuje się tylko pomiary nie wszystkich elementów wektora stanu [2]. Ten efekt jest niezwykle przydatny zwłaszcza w układach sterowania, gdzie brakujące informacje o systemie uzyskuje się z zakłóconych i niebezpośrednich pomiarów. Pokróćce zostanie przedstawiona idea filtru Kalmana.

Rozważmy system z pomiarami opisany w następującej postaci:

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + Bu(t) + Lw(t), \quad \text{dla } t \geq t_0 \quad (4.8)$$

$$y(t) = Cx(t) + v(t) \quad (4.9)$$

gdzie: A - macierz stanu,

B - macierz sterowań,

L - macierz oddziaływań zakłóceń systemowych,

C - macierz pomiarowa.

W równaniach (4.8, 4.9) sygnały y , w i v to odpowiednio pomiary oraz białe szumy gaussowskie o zerowej wartości średniej i macierzach kowariancji:

$$\begin{aligned} E(w(t)w(\tau)) &= Q\delta(t - \tau), Q = Q^T \geq 0 \\ E(v(t)v(\tau)) &= R\delta(t - \tau), R = R^T > 0 \end{aligned} \quad (4.10)$$

Procesy v i w są wzajemnie niezależne, zatem $E(w(t)v(\tau)) = 0 \forall t, \tau \geq t_0$.

Dla systemu określonego równaniami (4.8-4.10) poszukujemy estymaty $\hat{x}$ stanu x minimalizującej błąd estymacji (4.1).

Rozwiązaniem tego zagadnienia jest dane w postaci równania filtru Kalmana będącym równaniem różniczkowym [39]:

$$\dot{\hat{x}}(t) = A\hat{x}(t) + K_F(t)(y(t) - C\hat{x}(t)), \quad \hat{x}(t_0) = 0 \quad (4.11)$$

gdzie: K_F – współczynnik wzmocnienia filtru Kalmana, y - pomiary.

Błąd estymacji $\tilde{x}$ jest procesem stochastycznym o zerowej wartości średniej. Jego macierz kowariancji spełnia następujące macierzowe równanie różniczkowe Riccatiego:

$$\frac{dP}{dt} = AP(t) + P(t)A^T - P(t)C^TR^{-1}CP(t) + LQL^T, t \geq t_0, \quad (4.12)$$

z warunkiem początkowym,

$$P(t_0) = P_0. \quad (4.13)$$

Znając rozwiązanie równania (4.12) można określić współczynnik wzmocnienia filtru K_F , który jest określony zależnością:

$$K_F(t) = P(t)C^TR^{-1}. \quad (4.14)$$

Zatem, aby wyznaczyć K_F należy znać macierz P .

Ostatecznie dla wyznaczenia estymaty stanu istnieje konieczność rozwiązania dwóch równań tj. równania filtru oraz równania Riccatiego. W dalszej części pracy zostanie wykorzystany filtr Kalmana do zagadnień estymacji stanu zanieczyszczeń rzeki.

4.2 Estymacja stanu obiektu filtrem Kalmana z niemierzonymi współrzędnymi wektora stanu

Matematyczny model rzeki stanowi jedynie przybliżenie warunków rzeczywistych, z pewną dokładnością. W praktyce przyjmuje się, że pomiary obarczone są dodatkowym sygnałem o losowej wartości oznaczonej, jako szum lub zakłócenie pomiarowe.

Do badań przyjęto obiekt reprezentujący, jakość wody w akwenach w szczególności w rzekach, którego stopień zanieczyszczenia można określić za pomocą następujących wskaźników, jakości [1]. Są to:

- Biochemiczne zapotrzebowanie na tlen (*BZT*),
- Rozpuszczony tlen (*RT*).

Dokładność opisu zjawisk reprezentujących model matematyczny jest ściśle związana z jego złożonością. W praktyce występuje pewien kompromis w modelowaniu matematycznym, w którym dąży się do uzyskania prostych modeli, ale opisujących zjawiska w sposób wystarczający dla danego zadania [54], [58]. Opis matematyczny stanu, jakości wody zanieczyszczonej biochemicznie może dotyczyć dynamiki zmian wskaźników zależnych od czasu i długości rzeki.

Uwzględniając zjawiska zmian *BZT* i *RT* tj. adwekcji, dyfuzji oraz samooczyszczanie, ogólny model matematyczny przyjmuje następującą postać:

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} - \text{div}(\mathbf{V}\mathbf{x} - D\text{grad } \mathbf{x}) - \mathbf{A}\mathbf{x} + \delta = 0 \quad (4.15)$$

w którym $\mathbf{x}$ reprezentuje wektor stanu (*BZT*, *RT*), δ – gęstość źródła wewnętrznego, która określa intensywność wytwarzania lub pochłaniania przenoszonego czynnika, D – współczynnik dyfuzji w środowisku izotropowym, $\mathbf{V}$ – macierz prędkości strumienia, $\mathbf{A}$ - macierz współczynników reakcji *BZT-RT*, *div* - oznacza operator dywergencji, a *grad* (gradient) to wektorowy operator różniczkowy [40].

Powyższe równanie opisuje trójwymiarowy przypadek transportu adwekcyjno-dyfuzyjnego w czasie. Oznacza to uwzględnienie w modelu przenoszenia substancji *BZT-RT* oraz rozprzestrzeniania się w kierunku zmniejszającej się koncentracji. W praktyce przyjmują się pewne uproszczenia pozwalające na prostszy zapis równania (4.15).

Można wykazać, że pominięcie dyfuzji jest możliwe przy odpowiednich warunkach adwekcji [41]. W celu łatwiejszego zapisu modelu do obliczeń numerycznych

uwzględniającego dopływy boczne zakłada się umowny podział rzeki na odcinki. Dopływy boczne występują wówczas w warunkach brzegowych, zatem postać modelu i-tego odcinka rzeki jest następująca:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{x}_i(z, t) + \mathbf{V}_i(z) \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{x}_i(z, t) = \mathbf{A}_i(z) \mathbf{x}_i(z, t) + \mathbf{w}_{ri}(z, t) \quad (4.16)$$

z warunkami granicznymi:

$$\begin{aligned} \text{W.B.} \quad \mathbf{x}_i(0, t) &= \mathbf{M}_i \mathbf{x}_{i-1}(1, t) + \mathbf{w}_{bi}(t) + \mathbf{R}_{bi} u_{bi}(t) \\ \text{W.P.} \quad \mathbf{x}_i(z, t_0) &= \mathbf{x}_{i0}(z), \quad i=1, \dots, N \end{aligned} \quad (4.17)$$

Dalszą interpretację modelu z równania (4.16) z warunkami (4.17) można sprowadzić do równań różniczkowych zwyczajnych stosując metodę charakterystyk. Idea tej metody polega na zapisaniu równań tak, aby możliwe było wykorzystanie naturalnej właściwości obiektu, jaką jest prędkość przepływu. Rozważanie stanu BZT i RT pewnej objętości wody swobodnie przemieszczającej się określa się, jako charakterystykę. W przypadku modelu danego wzorem (4.16) i (4.17) rozważa się wiele charakterystyk, które zdefiniowane są zależnością (3.9). Takie podejście zapewnia uzyskanie równoważnego zapisu równaniami (4.16), (4.17) lecz na charakterystykach, jako zbiór równań różniczkowych zwyczajnych (patrz równanie 3.13). Warunki brzegowe znikają, gdyż charakterystyki dotyczą całej rzeki.

Przedstawione podejście umożliwia stosowanie matematycznego modelu rzeki o parametrach skupionych opisanego dużą liczbą równań równoważnemu modelowi o parametrach rozłożonych. W interpretacji tej pojawiają się zagadnienia pomiarów dla obiektów o parametrach rozłożonych, które reprezentowane są przez chwile czasowe $t_{1i}, \dots, t_{mi}$.

Osobnym zagadnieniem jest dobór lokalizacji dokonywanych pomiarów w celu uzyskania najlepszych estymat.

Rozważając zagadnienie estymacji „wzdłuż charakterystyk” należy zwrócić uwagę na równania pomiarowe, które stają się dyskretnymi w czasie. W takim opisie uzyskuje się „efekt” napotkania przez charakterystykę $z_i(t)$ stacji pomiarowych w punktach $z_{i1}, z_{i2}, \dots$, które odpowiadają dyskretnym chwilom czasowym $t_{1i}, t_{2i}, \dots, t_{mi}$. W związku z tym równanie pomiarowe przyjmuje postać:

$$y_i(t_{mi}^i) = C_i x_i(z_i(t_{mi}^i), t_{mi}^i) + v_{pi}(t_{mi}^i) \quad (4.18)$$

w którym $v_{pi}(t_{mi}^i)$ jest gaussowskim szumem białym o zerowej średniej i kowariancji:

$$E[v_{pi}(t_k)v_{pi}(t_k)^T] = V_p(t_k)\delta_{kl} \quad (4.19)$$

gdzie: t_k - chwila pomiarowa, E oznacza operator wartości oczekiwanej, δ_{kl} - funkcja Kroneckera która:

$$\delta_{kl} = \begin{cases} 0 & \text{dla } k \neq l \\ 1 & \text{dla } k = l \end{cases} \quad (4.20)$$

Należy podkreślić, że tak otrzymane pomiary (4.18) muszą być skoordynowane dla każdej z charakterystyk. Tak, więc interpretacja równań o parametrach rozłożonych z wykorzystaniem charakterystyk prowadzi do rozważań opisujących model dla wielu równań o parametrach skupionych z dyskretnymi w czasie pomiarami.

W procesie estymacji, w której model dany jest w postaci ciągłej (równania 3.13), a pomiary w postaci dyskretniej można wyróżnić dwie fazy: filtrację i predykcję. Równania opisujące predykcję i filtrację otrzymujemy z równań filtru Kalmana oraz Riccatiego, w których uwzględnia się nieciągłość pomiaru. Przy założeniu braku pomiaru macierz: $V_p(t \neq t_k) = \infty$ [2], [39], [43]. Poniżej podano istotę fazy filtracji i predykcji.

Filtracja

W fazie filtracji otrzymujemy estymaty w chwili t_k na podstawie estymat z poprzedniej chwili czasowej t_{k-1} i pomiarów bieżących. Proces ten opisują następujące równania:

$$\begin{aligned} \hat{x}(t_k | t_k) &= \hat{x}(t_k | t_{k-1}) + K_F(t_k)[y(t_k) - C\hat{x}(t_k | t_{k-1})] \\ \hat{x}(t_0 | t_{-1}) &= \bar{x}_0 \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} P(t_k | t_k) &= P(t_k | t_{k-1}) - K_F(t_k)CP(t_k | t_{k-1}) \\ P(t_0 | t_{-1}) &= P_0 \end{aligned} \quad (4.22)$$

$$K_F = P(t_k | t_{k-1}) - C^T [CP(t_k | t_{k-1})C^T + V_p(t_k)]^{-1} \quad (4.23)$$

gdzie: $\hat{x}(t_k | t_k)$ - estymata w chwili t_k otrzymana na podstawie pomiarów $y(t_0), \dots, y(t_k)$, $P(t_k | t_k)$ - kowariancja błędu estymacji, $K_F(t_k)$ - współczynnik wzmocnienia filtru.

Predykcja

W procesie predykcji oblicza się estymatę dla chwil $t \in (t_k, t_{k+1})$ tj. pomiędzy pomiarami, przyjmując za wartości początkowe estymaty otrzymane w fazie filtracji. Dla etapu predykcji słuszne są następujące równania:

$$\frac{d}{dt} \hat{x}(t | t_k) = A(t_k) \hat{x}(t | t_k) \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} & \hat{x}(t_k | t_k) \\ & \frac{d}{dt} P(t | t_k) A(t_k)^T + A(t_k) P(t | t_k) + W_r \\ & P(t | t_k) \end{aligned} \quad (4.25)$$

gdzie: $\hat{x}(t_k | t_k)$, $P(t_k | t_k)$ - estymata i kowariancja błędu estymacji przewidywanej dla $t > t_k$, W_r - kowariancja zakłóceń w_r [2], [39], [43].

Właściwością estymat uzyskanych z procesów filtracji i predykcji jest nieciągłość w chwilach otrzymywania pomiarów. Wynika to z dostarczania nowych informacji o obiekcie w postaci pomiarów $y(t_k)$. Wartości estymat $\hat{x}(t_k | t_k)$ modyfikowane są nowymi pomiarami ze wzmocnieniem $K_F(t_k)$ w odniesieniu do wartości estymaty otrzymanej z poprzednich obliczeń. Wielkość „poprawki” zależy od aktualnego pomiaru i dotychczasowej wartości estymaty. Może wystąpić sytuacja, gdy dla dużej różnicy pomiędzy pomiarem, a estymatą modyfikacja będzie mała, co wynika to z wartości współczynnika wzmocnienia filtra $K_F(t_k)$. Dla pomiarów obarczonych dużym błędem pomiarowym, wartości kowariancji błędu pomiarowego $V_p(t_k)$ przyjmują duże wartości w związku z tym wzmocnienie filtra jest małe. Oznacza to, że pomiary o dużych zakłóceniach wnoszą niewiele informacji o obiekcie. Realizując pomiary za pomocą dokładnych przyrządów otrzymuje się informację bliskie rzeczywistym, co powoduje, że wartości błędu pomiarowego są małe, a wzmocnienie filtra duże. Pomiedzy momentami pomiarowymi nie posiadamy informacji o obiekcie, estymata $\hat{x}(t | t_k)$ spełnia równanie (4.24) z warunkiem początkowym zdefiniowanym przez moment pomiaru, który jest wyznaczony w etapie filtracji. Dokonując pomiaru uaktualniamy estymatę, co prowadzi do jej nieciągłości. Ważną kwestią jest dokładność otrzymywanych estymat z równania filtra zależna od przyjętej metody rozwiązań [19], [39].

Pomiary ciągłe w czasie

Przypadek ciągłych w czasie pomiarów będzie rozważany dla interpretacji obiektu za pomocą charakterystyk. Hipotetycznie można rozważyć sytuację, iż dysponujemy pomiarami ciągłymi w czasie dla każdej charakterystyki. W konsekwencji takiego podejścia otrzymuje się opis modelu w postaci równań różniczkowych zwyczajnych i ciągłych w czasie pomiarów. Dla tak ustalonych rozważań będzie postawione zagadnienie estymacji stanu przy pomocy filtra Kalmana.

Pomiary w zagadnieniach estymacji stanu dla takiego podejścia wzdłuż charakterystyk opisane są następująco:

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{C}\mathbf{x}(t) + \mathbf{v}_p(t) \quad (4.26)$$

gdzie : $\mathbf{C} = [0 \ 1]$ - macierz pomiarowa,

$\mathbf{x}(t) = \text{col}[x_1(t), x_2(t)]$ - wektor stanu,

$\mathbf{v}_p(t)$ - zakłócenie pomiarowe.

Należy zaznaczyć, że do rozważań przyjmuje się, iż pomiary dokonuje się tylko dla wskaźnika RT, gdyż pomiary BZT są bezużyteczne ze względu na duży czas opóźnienia i konieczność obsługi laboratoryjnej 5-cio lub 20-to dniowej (zob. podrozdział 3.2) [13], [46].

Zagadnienia estymacji stanu opisanego modelem (3.13) sprowadza się do poszukiwania estymaty stanu $\hat{\mathbf{x}}(t)$ określonej na podstawie pomiarów (4.26) minimalizując macierz kowariancji błędu estymacji $\mathbf{P}(t) = E\{\tilde{\mathbf{x}}(t)\tilde{\mathbf{x}}(t)^T\}$. Macierz $\mathbf{P}(t)$ zdefiniowano na podstawie zależności (4.1), w której błąd estymacji oznaczono, jako $\tilde{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{x}(t) - \hat{\mathbf{x}}(t)$. Rozwiązaniem zagadnienia estymacji stanu jest równanie różniczkowe filtru Kalmana w postaci wektorowej są równania (4.11-4.14):

Zatem, aby otrzymać estymatę stanu $\hat{\mathbf{x}}(t)$ należy w pierwszej kolejności rozwiązywać równanie Riccatiego (4.12), następnie na podstawie jego rozwiązania określić współczynnik wzmocnienia filtru $K_F(t)$ podany wzorem (4.14), a w końcowym etapie rozwiązywać równanie estymaty stanu (4.11) zwane filtrem Kalmana.

Równania (4.11 - 4.14) dotyczą pojedynczej charakterystyki. Natomiast, aby otrzymać rozwiązanie zagadnienia estymacji stanu dla modelu o parametrach rozłożonych należy zrealizować proces estymacji dla zadanych wszystkich charakterystyk w obszarze przestrzenno – czasowym (zob. rys. 3.7).

Jakość estymaty otrzymanej z równania (4.11) w dużym stopniu zależy od wzmocnienia filtru $\mathbf{K}_F$. Wartość $\mathbf{K}_F$ uzależniona jest od charakterystyk sygnałów stochastycznych oddziałujących na dany obiekt danych w postaci kowariancji zakłóceń systemowych i pomiarowych. Wyznaczenie w/w kowariancji sygnałów niekiedy stanowi trudne zadanie. Dlatego też poszukuje się innych rozwiązań eliminujących te przeszkody. Jedną z propozycji jest podejście, w którym adaptacyjnie dobiera się współczynnik wzmocnienia filtru. W niniejszej dysertacji stanowi to główny nurt rozważań.

4.3 Badania symulacyjne estymacji stanu filtrem Kalmana

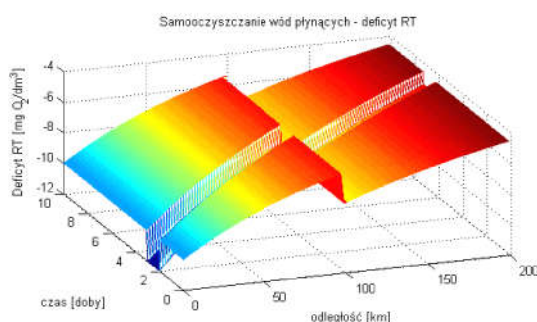
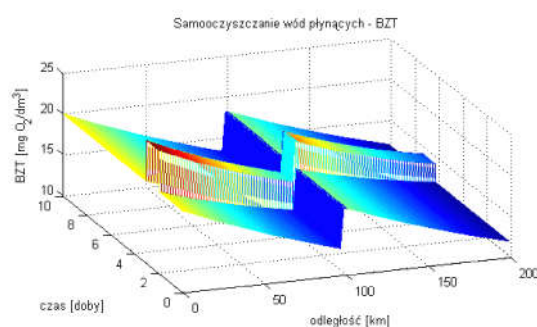
Przeprowadzono eksperymenty symulacyjne dla hipotetycznej rzeki z pomiarami RT. W celu przybliżenia rzeczywistych warunków rzeki przyjmuje się, iż pomiary nie są dokładne, dlatego dodaje się do nich sygnał zakłócający. Źródłem tych zakłóceń może być:

- niedokładność przyrządów pomiarowych,
- dopływ małych cieków wodnych,
- obecność glonów oraz gromadzenie się osadów dennych.

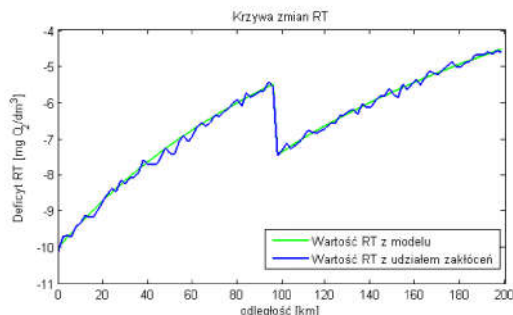
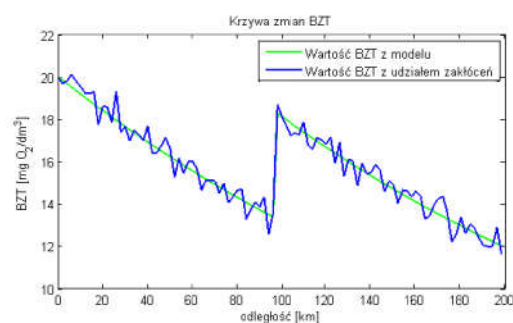
Sygnały te przyjmuje się, jako stochastyczne o rozkładzie gaussowskim, przy znanej wartości oczekiwanej i odchyleniu standardowym.

Badania przeprowadzono przy uwzględnieniu różnych wartości początkowych BZT i RT, które z upływem czasu maleją (zob. rys. 4.2). Natomiast rys. 4.3 obrazuje sytuację, kiedy dopływające zanieczyszczenia BZT przyjmują duże wartości, a w rzece występuje mały deficyt tlenowy. W wyniku tego dopiero po upływie kilku dni pojawia się największy deficyt tlenu.

a)

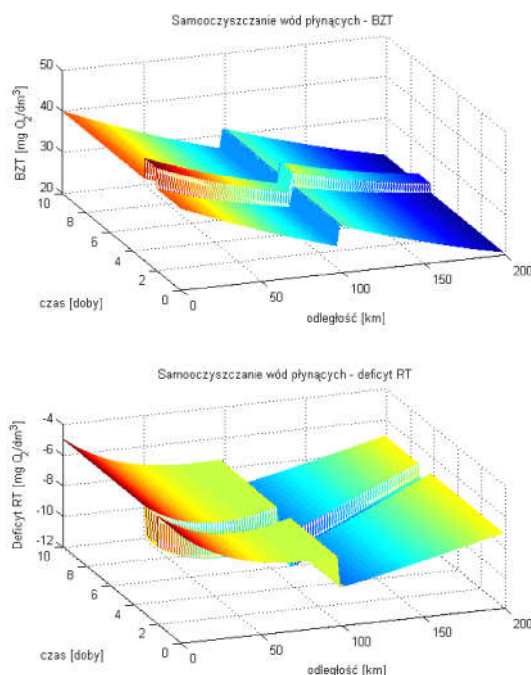


b)

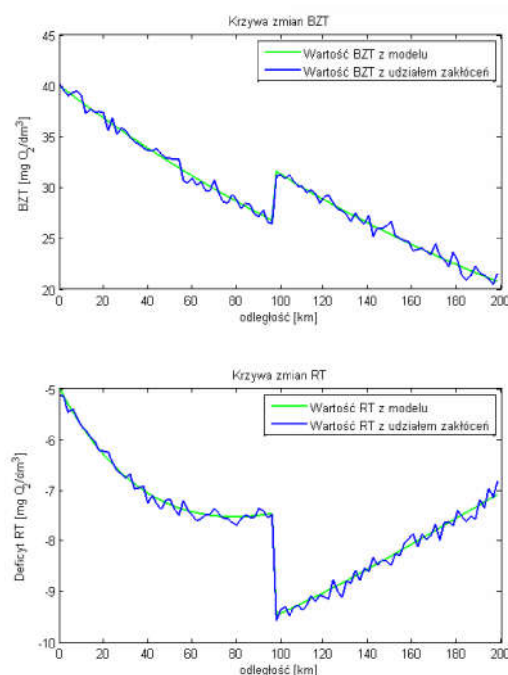


Rys. 4.2 Rozkład BZT – RT $x_1(t,0)=20$, $x_2(t,0)=-10$: a) bez udziału zakłóceń, b) charakterystyka z zakłóceniami

a)

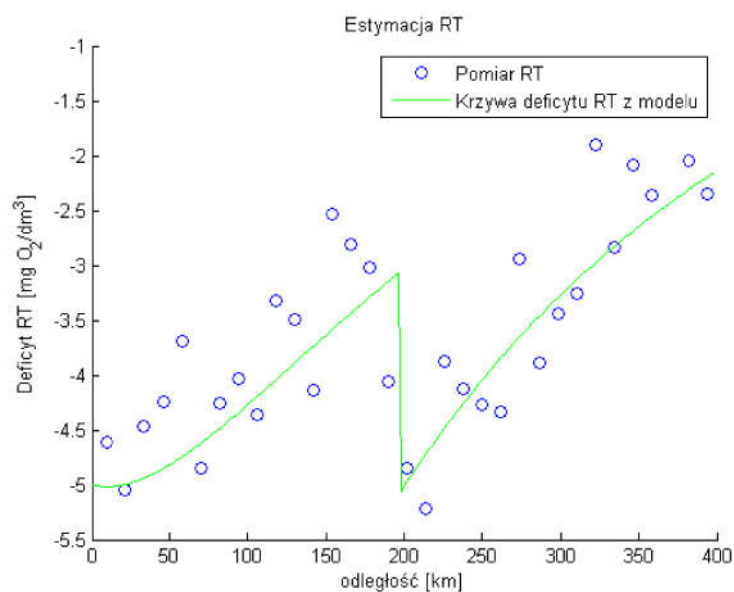


b)



Rys. 4.3 Rozkład BZT – RT $x_1(t,0)=40$, $x_2(t,0)=-5$: a) bez udziału zakłóceń, b) charakterystyka z zakłóceniami

Badania symulacyjne zrealizowano z krokiem $dz=12$ [km], co oznacza, że stacje pomiarowe zlokalizowane są co 12 km. W rezultacie otrzymano punkty dyskretne, wartości pomiarowych z niedokładnościami generowanymi sygnałem stochastycznym (zob. rys. 4.4). Uwzględniając niedokładność przyrządu pomiarowego oraz wpływ środowiska naturalnego otrzymano przybliżone pomiary rzeczywiste, co pokazano na rys. 4.3.



Rys. 4.4 Dyskretne pomiary RT wzdłuż charakterystyki o niskiej, jakości

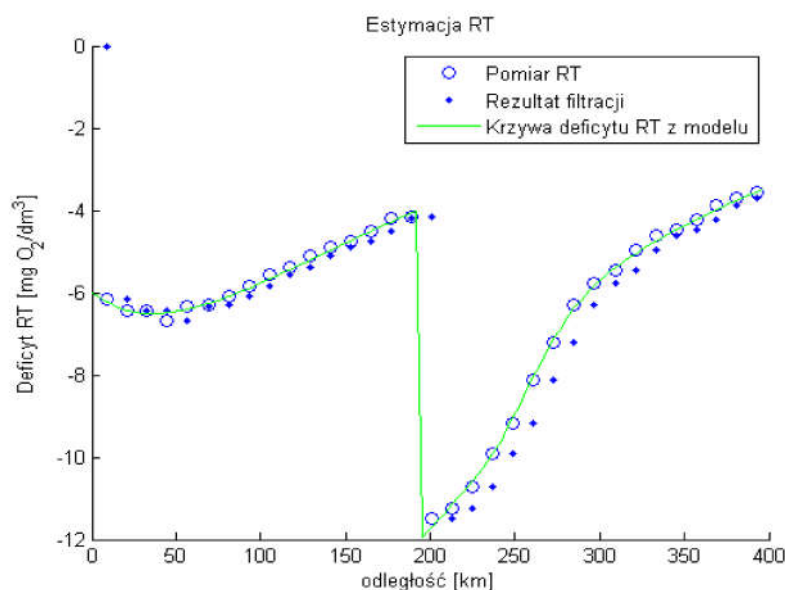
Posiadając dyskretne pomiary można zrealizować proces filtracji filtrem Kalmana., W wyniku przeprowadzonych badań otrzymano następujące wartości współczynników wzmocnienia, BZT wynosi $K_{F_{BZT}} = -3$, zaś RT $K_{F_{RT}} = 0.9$.

W fazie filtracji rozwiązano układ równań:

$$\begin{cases} \hat{x}_{BZT}(t_k) = \hat{x}_{BZT}(t_{k-1}) + K_{F_{BZT}} [y(t_{k-1}) - \hat{x}_{RT}(t_{k-1})] \\ \hat{x}_{RT}(t_k) = \hat{x}_{RT}(t_{k-1}) + K_{F_{RT}} [y(t_{k-1}) - \hat{x}_{RT}(t_{k-1})] \end{cases} \quad \hat{x}(0) = 0 \quad (4.27)$$

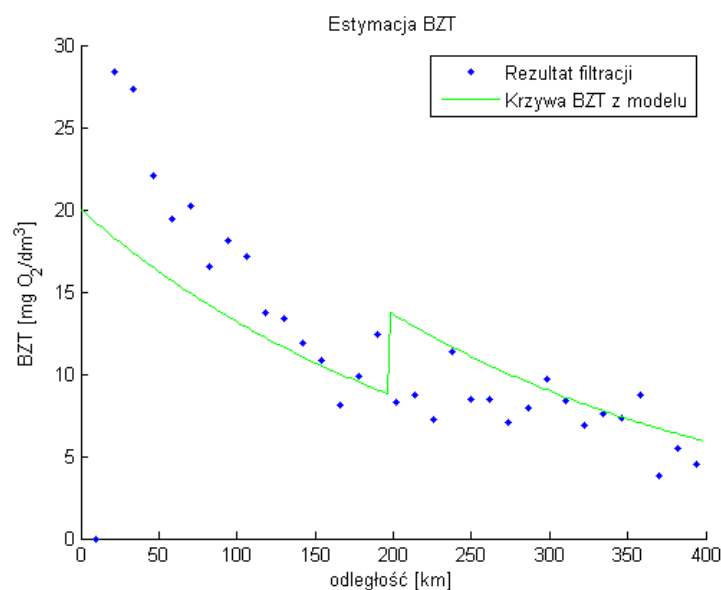
w którym $\hat{x}_{BZT}$ - estymata BZT, $\hat{x}_{RT}$ - estymata RT, y – wartość pomiarów w dyskretnych chwilach pomiarowych.

Analizując otrzymane wyniki jak na rys. 4.5 zauważono, że wartości estymat są generowane w pobliżu punktów pomiarowych. Obrazuje to rys. 4.6. Istotny wpływ, na jakość estymacji ma długość okresu pomiarowego (częstotliwości pomiarów). Wydłużenie tego okresu, czyli rzadziej dokonywane pomiary pogarszają estymację. Będzie to wyjaśnione w dalszej części pracy.



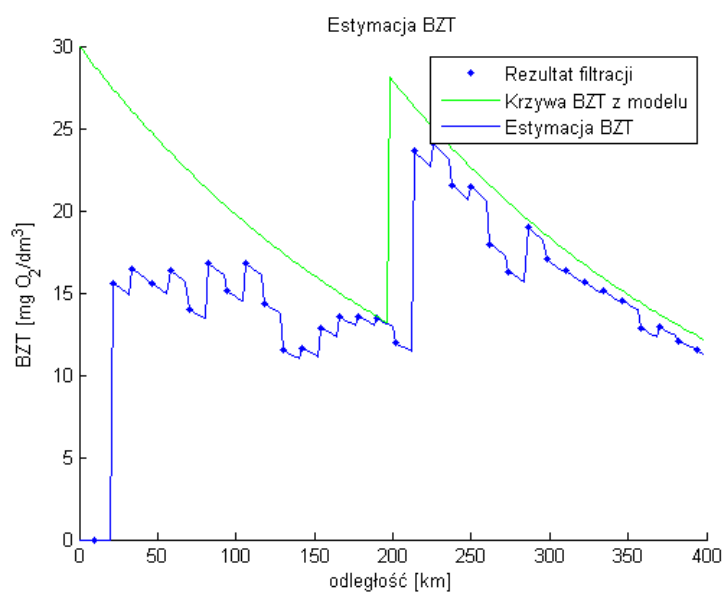
Rys. 4.5 Estymacja wskaźnika RT filtrem Kalmana z okresem pomiarów $T_p = dt$

W fazie filtracji otrzymujemy informację o wartości estymaty BZT, pomimo braku jego pomiarów. W tej fazie następują też korekty estymaty BZT, w których źródłem jest różnica między pomiarem RT, a jego estymatą. Rezultaty symulacji dla BZT prezentuje rys. 4.6.

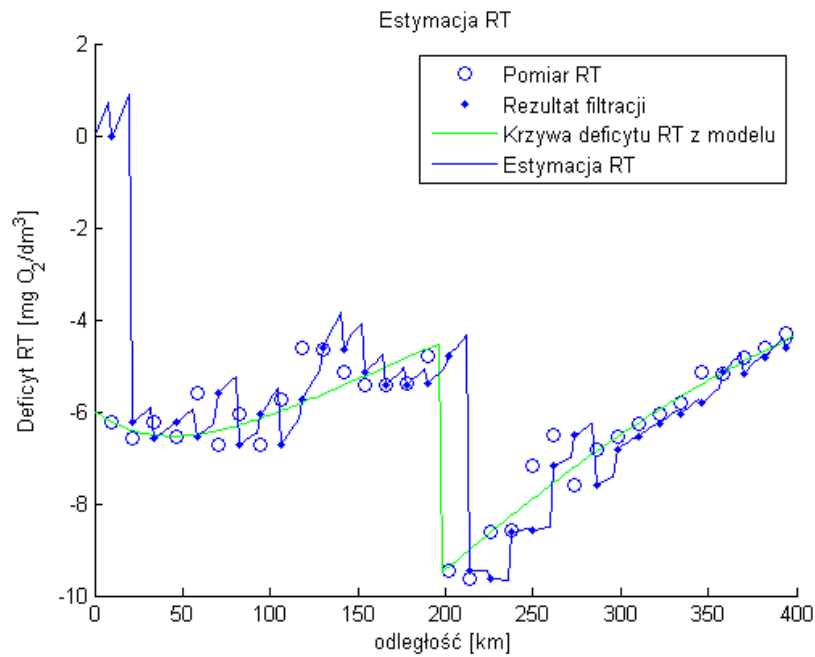


Rys. 4.6 Estymacja wskaźnika BZT filtrem Kalmana dla $x_1(0)=20$, $T_p = dt$

Pomiędzy dyskretnymi punktami pomiarowymi występuje faza predykcji, w której wyznaczamy estymatę stanu do kolejnej chwili pomiarowej, przyjmując za wartości początkowe, estymaty otrzymane w fazie filtracji. Końcowe rezultaty procesu estymacji stanu rzeki dla pojedynczej charakterystyki przedstawiono na rys. 4.7 i 4.8.

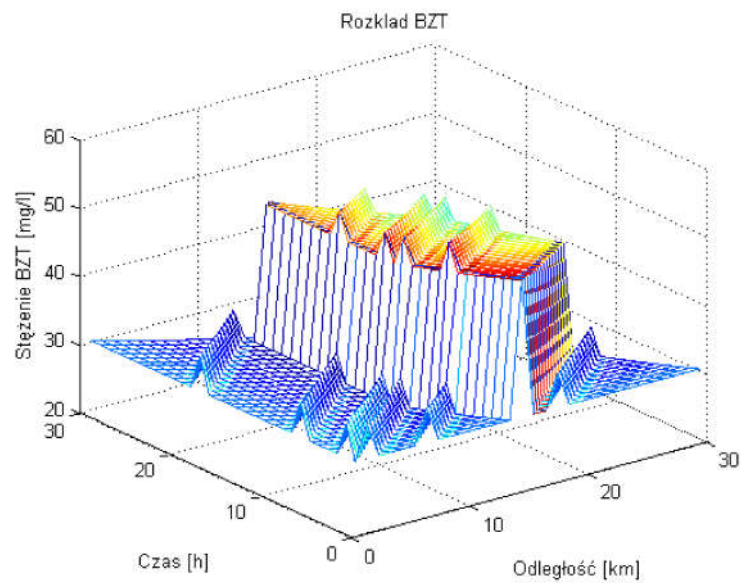


Rys. 4.7 Estymacja wskaźnika BZT dla $x_1(0)=30$, $T_p = dt$

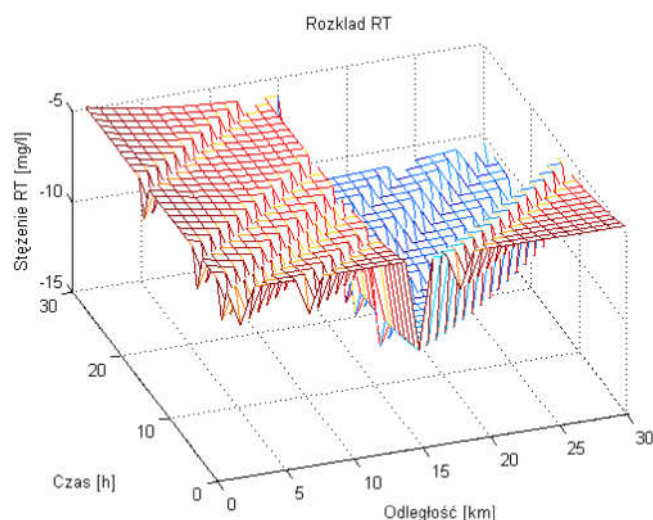


Rys. 4.8 Estymacja wskaźnika RT dla $x_2(0)=-6$, $Tp = dt$

Kolejne rozważania dotyczą zagadnienia estymacji stanu rzeki przy uwzględnieniu nagłych zmian wartości BZT i RT wzdłuż jej długości reprezentujących pojawienia się kilku dopływów bocznych. Idea tego rozważania została zaprezentowana na rys. 4.9 i 4.10.

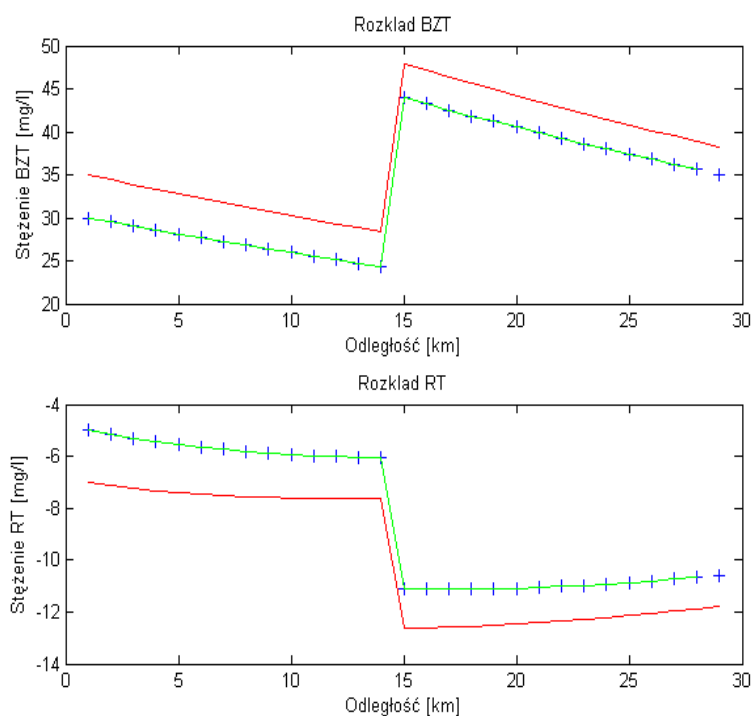


Rys. 4.9 Rozkład BZT z zanieczyszczonym dopływem bocznym



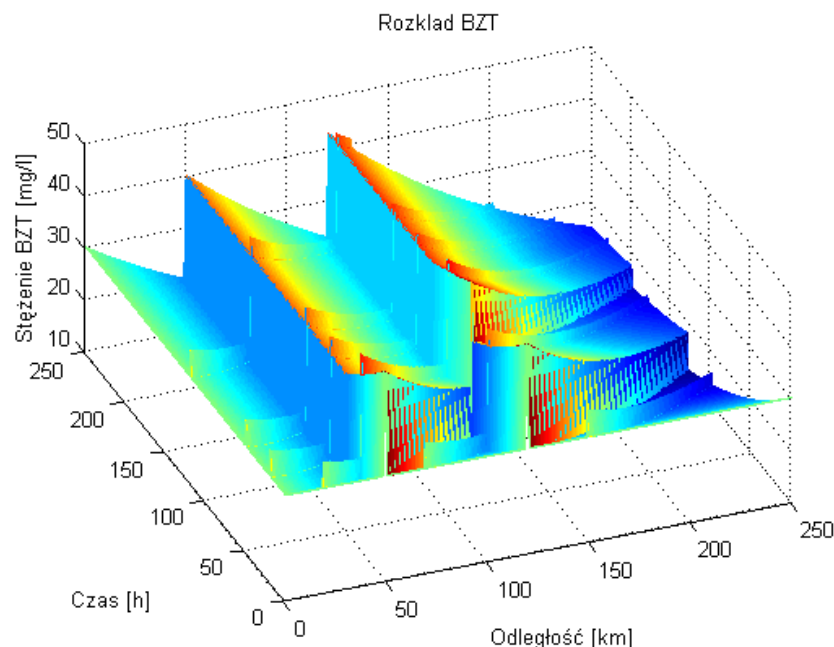
Rys. 4.10 Rozkład RT z zanieczyszczonym dopływem bocznym

Na rys. 4.9-4.10 widoczny jest efekt bocznego dopływu, który skokowo zwiększa wartość BZT. Ponadto wygenerowano też lokalne skoki wartości BZT i RT wzdłuż osi czasu. Reprezentują one chwilowe pogorszenie się warunków w wodzie tj. zmniejszenie wartości wskaźnika RT i zwiększenie wartości dla BZT. Efekty tych zmian SA widoczne na całej przestrzeni. Przebiegi rozkładu BZT, RT przedstawiają rys. 4.9-4.10, i zauważono, że pojawienie się najniebezpieczniejszych warunków w rzece występuje poniżej dopływu bocznego. Na rys.4.10 zaprezentowano sytuację, gdzie poniżej dopływu bocznego wartość wskaźnika RT obniża się do najmniejszego poziomu.

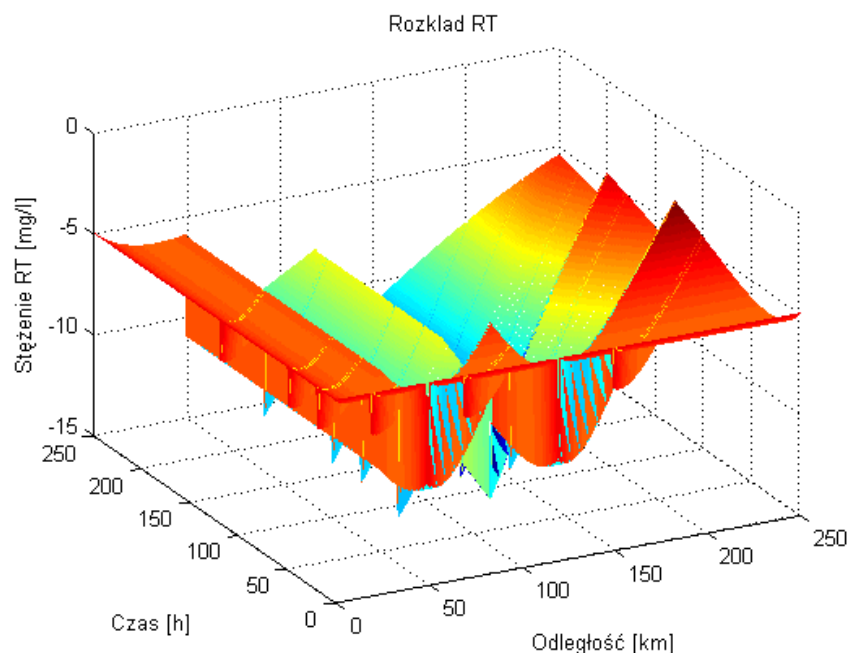


Rys. 4.11 Przebiegi BZT i RT, dla dwóch wybranych charakterystyk z rys. 4.9, 4.10

Dalsze rezultaty badań symulacyjnych dotyczą rozwiązania równań różniczkowych cząstkowych dla rzeki długiej przedstawiające rozkłady wskaźników BZT i RT w postaci hiperpowierzchni. Uwzględniono takie sytuacje, gdy pojawiają się dopływy boczne o różnym stopniu zanieczyszczeń i powodujące skokowe zmiany BZT-RT.

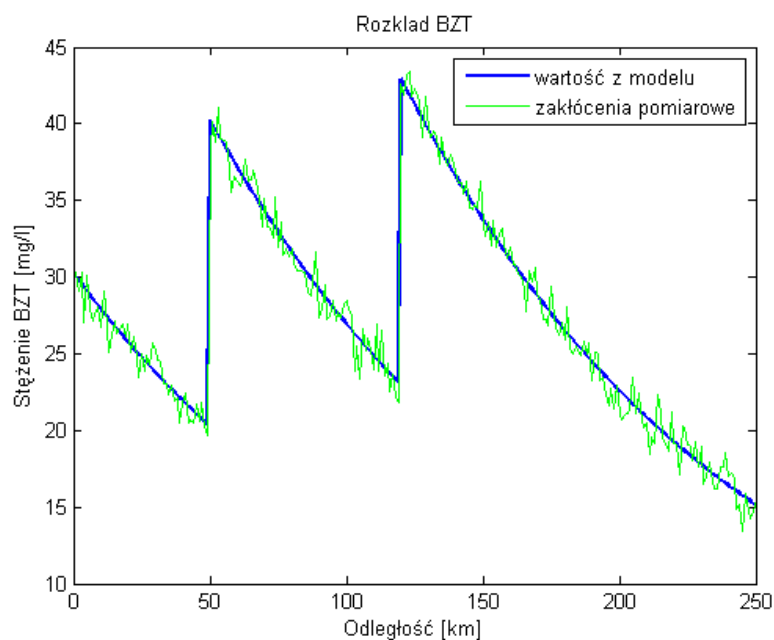


Rys. 4.12 Przestrzenno – czasowy rozkład BZT dla rzeki długiej z uwzględnieniem dwóch dopływów bocznych

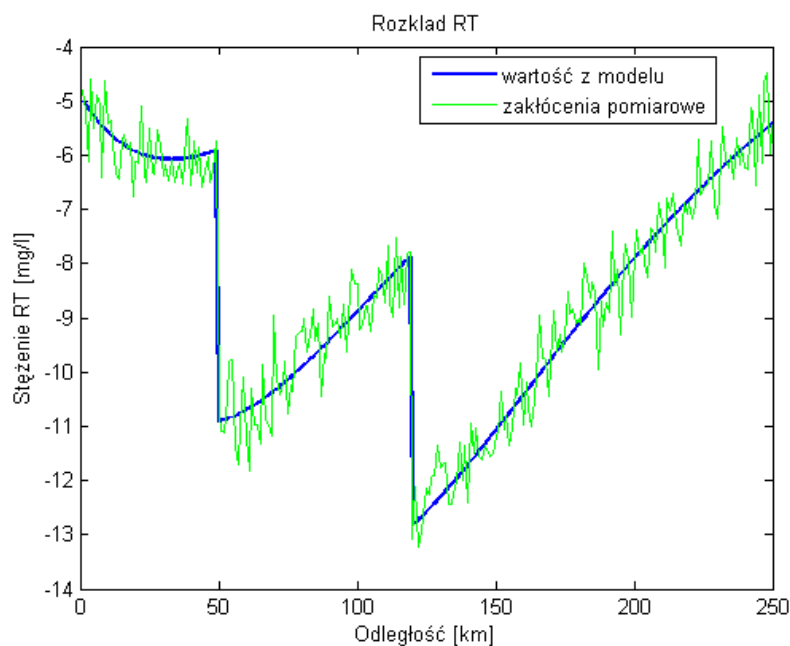


Rys. 4.13 Przestrzenno - czasowy rozkład RT dla rzeki długiej z uwzględnieniem dwóch dopływów bocznych

Z otrzymanej hiperpowierzchni na rys. 4.12 oraz 4.13 wyodrębniono charakterystykę, na której będą prowadzone dalsze rozważania dotyczące estymacji stanu rzeki. Aby uwiarygodnić rzeczywiste warunki panujące w rzece dodano dodatkowe zniekształcenia warunków granicznych w postaci zakłóceń stochastycznych o różnych intensywnościach. Ponadto wartości wskaźników BZT i RT z modelu zakłócono gaussowskim sygnałem stochastycznym wygenerowanym na potrzeby badań symulacyjnych (zob. rys. 4.14 – 4.15).

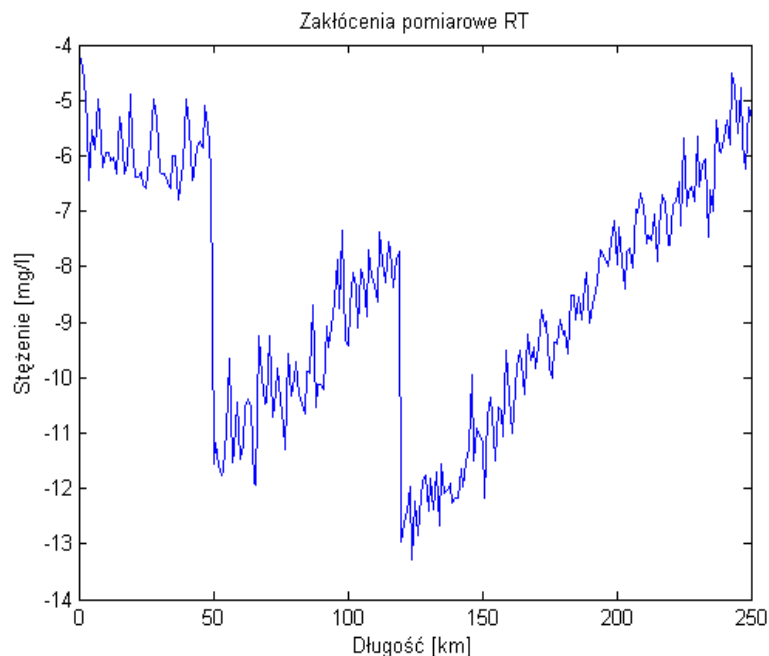


Rys. 4.14 Wartości BZT uzyskane z modelu na charakterystyce z udziałem zakłóceń

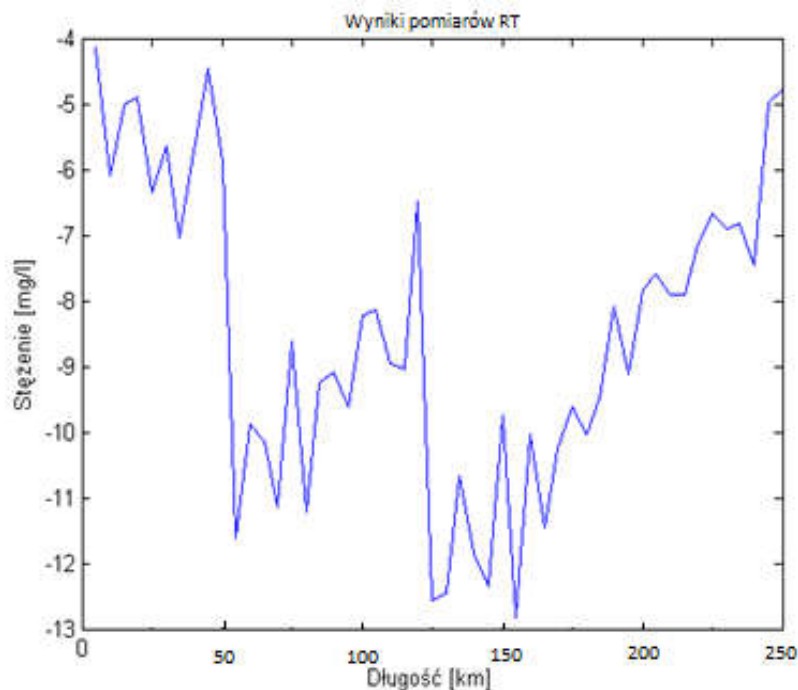


Rys. 4.15 Wartości RT uzyskane z modelu na charakterystyce z udziałem zakłóceń

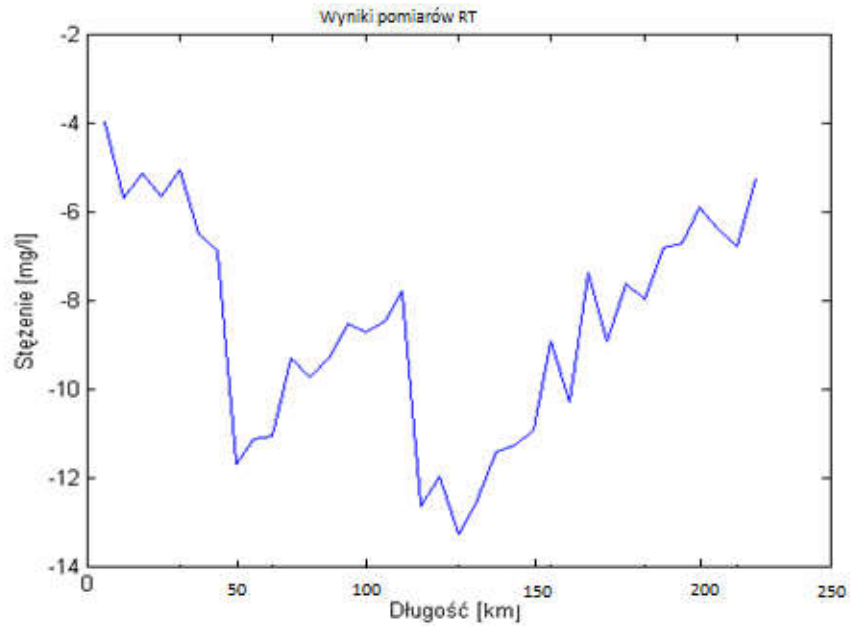
Dysponując otrzymanymi wynikami na charakterystykach przeprowadzono proces filtracji, w którym uwzględniono różny krok dyskretyzacji mający wpływ, na jakość otrzymanych wyników. Ponadto wykonano szereg badań symulacyjnych dla różnych wariantów danych początkowych BZT-RT (zob. rys. 4.16 – 4.19).



Rys. 4.16 Przebieg wskaźnika RT dla charakterystyki z zakłóceniami $T_p = dt$

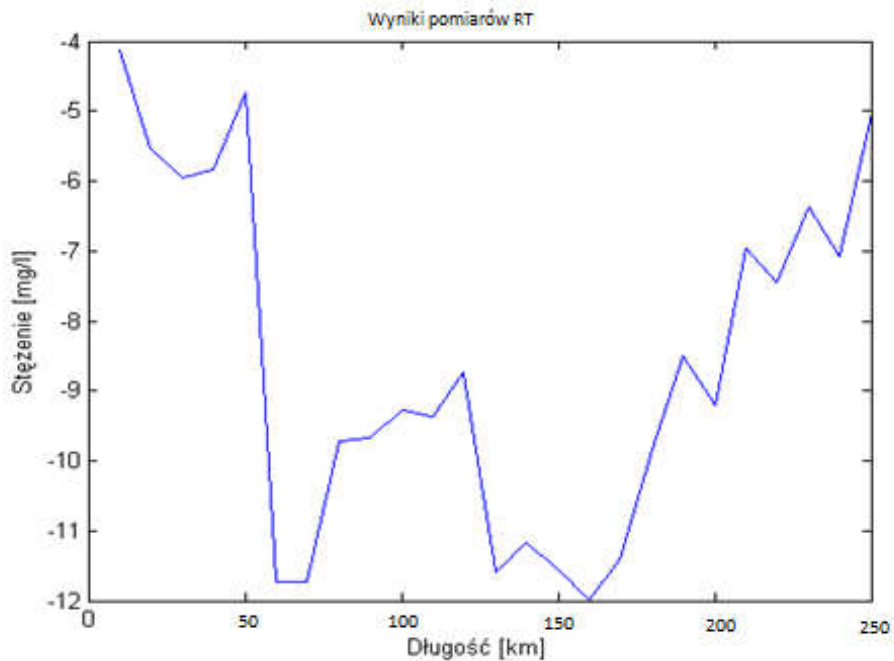


Rys. 4.17 Wyniki pomiarów wskaźnika RT z dyskretyzacją $T_p = 5dt$



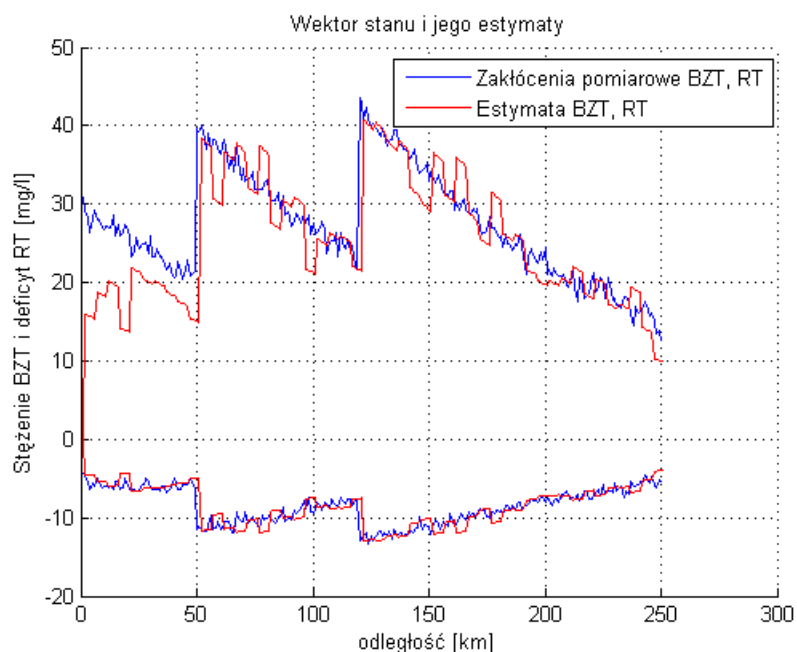
Rys. 4.18 Wyniki pomiarów wskaźnika RT z dyskretyzacją $T_p = 7dt$

Na rys. 4.16-4.19 przedstawiono przebiegi pomiarów RT otrzymane odpowiednio dla kroków dyskretyzacji pomiarów $T_p = dt, 5dt, 7dt, 10dt$. Wartość dt oznacza krok dyskretyzacji czasowej stosowany w rozwiązywaniu równań modelu.



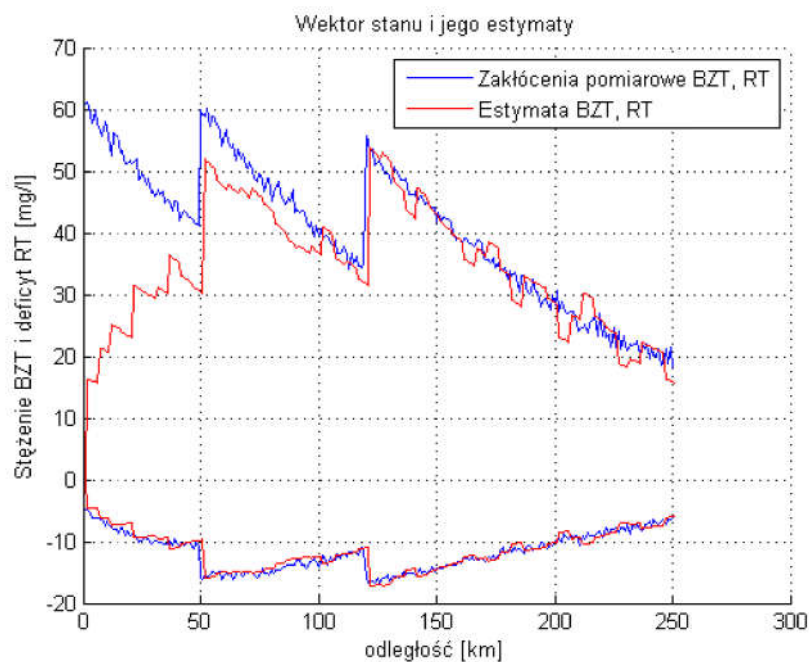
Rys. 4.19 Wyniki pomiarów wskaźnika RT z dyskretyzacją $T_p = 10dt$

Równanie 4.11 filtru generują estymaty, których przebiegi są zgodne ze zmianą wektora stanu. Zważywszy na fakt, że dokonujemy pomiaru tylko RT, jego estymata $\hat{x}_2$ szybciej i z mniejszym błędem podąża za zmianami odpowiadającym mu x_2 , a niżeli czyni to estymata $\hat{x}_1$ BZT w stosunku do x_1 . Wyniki symulacji dla różnych warunków początkowych przedstawiono na rys. 4.20 – 4.22.

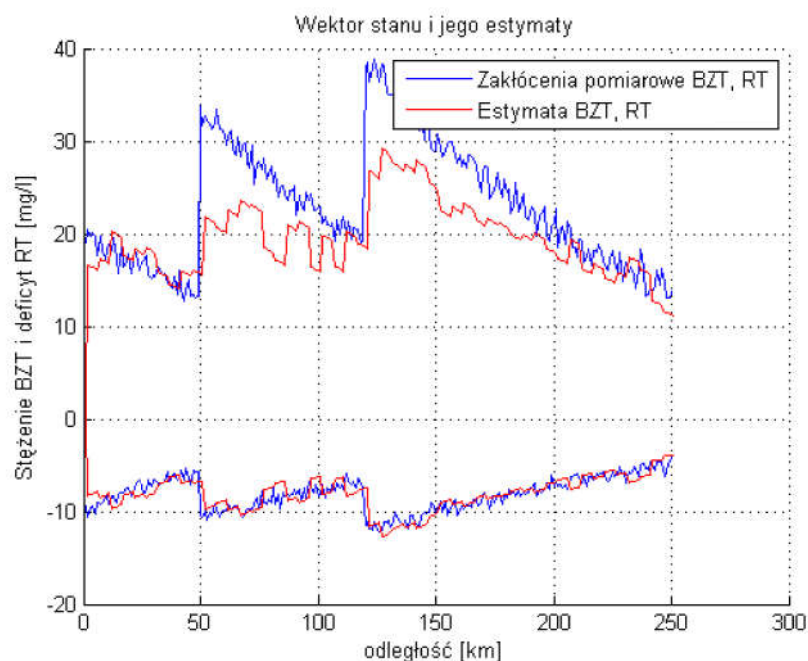


Rys. 4.20 Wektor stanu i jego estymaty dla początkowych wartości BZT=30, RT=-5

Istotny wpływ na przebiegi estymat mają ich warunki początkowe, które występują t_0 zwłaszcza dla współrzędnej BZT. Początkowe duże różnice między $x_1(t_0)$, a $\hat{x}_2(t_0)$ zanikają w trakcie realizacji procesu estymacji (zob. rys. 4.21)



Rys. 4.21 Wektor stanu i jego estymaty dla początkowych wartości BZT=60, RT=-5



Rys. 4.22 Przebieg stanu i jego estymaty dla początkowych wartości stanu BZT=20, RT=-10

Analizując otrzymane wyniki badań zauważamy, że wartości estymat RT są dokładniejsze niżeli BZT. Wynika to z braku bezpośredniego pomiaru tej wielkości tak jak ma to miejsce w przypadku RT. W miarę dostarczania nowych informacji o stanie z punktów pomiarowych rezultaty estymacji są coraz lepsze. Proces estymacji przy nagłych zmianach wartości wektora stanu spowodowanych bocznymi dopływami przebiegał poprawnie.

5. Projekt adaptacyjnego algorytmu estymacji stanu obiektu szeregowego

W niniejszym rozdziale przedstawiono koncepcję adaptacyjnego algorytmu zmian współczynnika wzmocnienia filtra K_F opartego na strukturze filtra Kalmana. Proponowany filtr w sposób rekurencyjny wyznacza estymatę wektora stanu obiektu na podstawie pomiarów. Należy zaznaczyć, że zarówno obiekt jak i pomiary są poddane sygnałom zakłócającym. Wprowadzenie algorytmu adaptacyjnego omija niedogodności wynikające z konieczności oszacowania charakterystyk sygnałów oddziałujących na rozważany obiekt. Charakterystyki te występują, jako wymuszenia w równaniu Riccatiego. Przy klasycznym podejściu rozwiązuje się te nieliniowe równania różniczkowe w celu wyznaczenia współczynnika wzmocnienia filtra.

W rozprawie zaproponowano autorskie podejście adaptacyjne dla filtra polegające na bieżącej modyfikacji jego współczynnika wzmocnienia K_F . Badania symulacyjne tych rozważań realizowano dla modelu biochemicznie zanieczyszczonej rzeki. Istotą takiego podejścia jest zastosowanie różnicy między pomiarem, a odpowiadającej mu współrzędnej estymaty stanu do korekty wartości współczynnika wzmocnienia. Korekta ta jest dokonywana dla każdej chwili pomiarowej, zaś uaktualnienie wartości wzmocnienia jest realizowane z odpowiednim współczynnikiem ostrożności.

Przy tych założeniach skonstruowany filtr dokonuje korekty wartości estymaty na podstawie kolejnego pomiaru i aktualnej wartości wzmocnienia K_F .

Algorytm adaptacyjny tak modyfikuje współczynnik wzmocnienia filtra K_F , aby zmniejszały się błędy estymacji uzyskując „dopasowanie się” do aktualnych warunków funkcjonowania obiektu.

Przeprowadzone eksperymenty symulacyjne dokonano dla różnych wartości konfiguracyjnych parametrów występujących w algorytmie.

5.1 Paradygmaty algorytmów

Słowo „algorytm” pochodzi od nazwiska arabskiego matematyka i astronoma z IX w. M. Al-Khwarizmi, który przedstawił w swojej pracy podstawowe metody działań arytmetycznych na liczbach dziesiętnych, jak również obliczenia pierwiastków kwadratowych. Przedstawione schematy postępowania w celu postawionych zadań były poprawne, dokładne, jednoznaczne, efektywne, krótko mówiąc „algorytmy”. Od tej pory system dziesiętny oraz algorytmy numeryczne odegrały ogromną rolę w cywilizacji, umożliwiając rozwój różnych dziedzin nauki oraz technologii. Naukowcy zajęli się opracowaniem coraz bardziej złożonych algorytmów stosowanych w rozwiązywaniu najróżniejszych zadań oraz projektowaniem nowego oprogramowania [11].

Ogromnego postępu dokonał w tej dziedzinie w 1842 roku Charles Babbage, który na podstawie swoich doświadczeń sformułował ideę maszyny analitycznej zdolnej do realizacji złożonych algorytmów matematycznych. W pracy Babbage wspierała Ada Lovelace, która przetłumaczyła dla niego prace włoskiego matematyka dotyczące algorytmu obliczania liczb Bernoulliego. Prace Lovelace dotyczące implementacji tego algorytmu na maszynę różnicową zawierały opis swoistego języka programowania. Programy pisane przez naukowca zostały przetestowane na modelu maszyny różnicowej wykonanym w XX wieku i okazały się poprawne. Zanim zbudowano pierwsze komputery, istniały już solidne podstawy informatyki teoretycznej. Algorytm wyrażony w najprostszym z możliwych języków okazały się dla urządzeń najlepszym rozwiązaniem [22].

W ostatnich trzydziestu latach, dzięki upowszechnieniu komputerów osobistych, informatyka stała się bardzo ważną gałęzią gospodarki. Na świecie pracują miliony programistów zajmujących się tworzeniem oraz doskonaleniem oprogramowania lub poszukiwaniem nowych, efektywniejszych algorytmów. Wraz z oparciem na komputerach funkcjonowania całego społeczeństwa, coraz większą wagę przykładą się do wyszukiwania błędów w implementacjach lub założeniach algorytmów. I w ramach tej ewolucji u podstaw informatyki leżała arytmetyka natomiast u podstaw algorytmiki logika matematyczna.

Zadaniem algorytmu jest przeprowadzenie systemu z pewnego stanu początkowego do pożądanego stanu końcowego. Badaniem algorytmów zajmuje się, algorytmika czyli dyscyplina gdzie podstawowym działem informatyki zajmującym się poszukiwaniem,

konstruowaniem i badaniem własności algorytmów w kontekście ich przydatności do rozwiązywania problemów za pomocą komputerów. Algorytm może zostać zaimplementowany w postaci programu komputerowego. Algorytmy zwykle formułowane są w sposób ścisły w oparciu o język matematyki. Najstarszym znanym algorytmem jest algorytm Euklidesa.

Definicja **algorytmu w informatyce** to **kompletny, jednoznaczny**, przepis przetworzenia w **skończonym czasie**, pewnych danych wejściowych do pewnych danych wynikowych. Przy analizowaniu bądź projektowaniu algorytmu zakłada się, że dostarczane dane wejściowe są poprawne, czasem istotną częścią algorytmu jest nie tylko przetwarzanie, ale i weryfikacja danych dotyczy to zdolności adaptacyjnych algorytmu, który na bieżąco dostosowuje się do zmieniających warunków pracując w czasie rzeczywistym [4], [5].

Metody tworzenia algorytmów:

- **dziel i zwyciężaj** – podział problemu na kilka mniejszych, aż ich rozwiązania staną się oczywiste,
- **programowanie dynamiczne** – podział problemu na kilka, ważność każdego z nich, które są oceniane i po pewnym wniosku wykorzystuje się rozwiązanie głównego problemu;
- **metoda zachłanna** – wybiera się najbardziej obiecującą w danym momencie drogę rozwiązania;
- **programowanie liniowe** – rozwiązanie następuje po przez funkcję, jakości gdzie szukamy jej minimum;
- **poszukiwanie i wyliczanie** – przeszukujemy zbiór danych, aż do odnalezienia rozwiązania;
- **heurystyka** – człowiek na podstawie swojego doświadczenia tworzy algorytm, który działa w najbardziej prawdopodobnych warunkach, rozwiązanie zawsze jest przybliżone.

Istnieją również znane techniki implementacji algorytmów komputerowych.

- **proceduralność** – algorytm dzielimy na szereg podstawowych procedur, wiele algorytmów współdzieli wspólne biblioteki standardowych procedur, z których są one wywoływane w razie potrzeby;
- **praca sekwencyjna** – wykonywanie poszczególnych procedur algorytmu, według kolejności ich wywołań, naraz pracuje tylko jedna procedura;

- **praca wielowątkowa** – procedury wykonywane są sekwencyjnie, lecz kolejność ich wykonania jest trudna do przewidzenia dla programisty;
- **praca równoległa** – wiele procedur wykonywanych jest w tym samym czasie, wymieniają się one danymi;
- **rekurencja** – procedura lub funkcja wywołuje sama siebie, aż do uzyskania wyniku lub błędu;
- **obiektowość** – procedury i dane łączymy w pewne klasy reprezentujące najważniejsze elementy algorytmu oraz stan wewnętrzny wykonującego je systemu;
- **algorytm probabilistyczny** – działa poprawnie z bardzo wysokim prawdopodobieństwem, ale wynik nie jest pewny.

Program jest algorytmem zapisanym w języku zrozumiałym dla maszyny (kodzie maszynowym). Każdy poprawny kod maszynowy da się przełożyć na zestaw instrukcji dla teoretycznego modelu komputera, maszyny Turinga. Zwykle algorytmy pracują na danych wejściowych i uzyskują z nich dane wyjściowe. Informacje zapisane w pamięci maszyny traktuje się, jako jej stan wewnętrzny. Niektóre algorytmy mają za zadanie wyłącznie przeprowadzanie komputera z jednego stanu wewnętrznego do innego. Komputery mogą reagować tylko na całkowicie jednoznaczne instrukcje. Jeżeli dany algorytm da się wykonać na maszynie o dostępnej mocy obliczeniowej i pamięci oraz w akceptowalnym czasie, to mówi się, że jest obliczalny [27].

Implementacja algorytmu w ogólności oznacza występowanie pewnego podobieństwa algorytmu opisanego w ludzkim języku do fizycznego zjawiska lub procesu. Jednak o implementacji możemy mówić również wtedy, kiedy pewien system zachowuje się podobnie do algorytmu. Dla przykładu mózg ptaka implementuje arytmetykę w postaci sieci neuronowej, dzięki temu zwierzę jest w stanie porównywać pewne odstępy czasu. W przypadku maszyn algorytm może zostać zaimplementowany, jako pewna sieć połączeń elektrycznych, pneumatycznych bądź mechanicznych. Przykładem może być tutaj adaptacyjny algorytm, który reaguje i wpływa na współczynnik wzmocnienia (reakcji) pewnego procesu w estymacji [9],[10], [22].

W obecnym czasie algorytmika znaczy więcej niż tylko pewien dział informatyki. Stała się odrębną dziedziną wkraczającą w szereg nauk. Właśnie natura algorytmiki sprawiła, iż wykorzystuje się ją w dziedzinach gdzie zastosowanie mają układy cyfrowe. Obecnie podejmując różne wyzwania stawiane przed algorytmiką, da się rozwiązać przy pomocy komputerów nie mniej jednak implikacje filozoficzne nie mogą być rozwiązywalne, nie ze

względem na moc obliczeniową maszyn liczących, lecz na ograniczenia nasze zwykłych śmiertelników.

Wraz z rozwojem obecnej cywilizacji problemy w/w jak i nowe nierozwiązane jeszcze do tej pory czekają na zastosowanie poniższych algorytmów.

Algorytmy równoległe - program nie jest wykonywany tylko jeden raz na jednym procesorze, ale wielokrotnie równoległe na wielu różnych maszynach. Podejście takie jest stosowane od lat w superkomputerach. Nowym pomysłem jest zastosowanie sieci zwykłych komputerów tworzących klastery. Całe zadanie jest wtedy rozdzielane na wiele maszyn i obliczane równoległe przy pomocy tysięcy procesorów, takie podejście jest wykorzystywane do celu analizy DNA. W jednej kropli wody znajdują się miliony cząstek tego kwasu. Jeżeli zsyntetyzuje się je tak, aby wykonywały pewien algorytm, to w ułamku sekundy potrzebnym na reakcje chemiczne komputer oparty na DNA znajdzie rozwiązanie. Dziedziną nauki zajmującą się algorytmami w połączeniu z biologią jest bioinformatyka.

Algorytmy sztucznej inteligencji – np.: znajdowanie najkrótszej trasy łączącej pewną liczbę miast. Oznacza to, że algorytmy mogą radzić sobie z takimi problemami tylko w przybliżeniu lub w bardzo szczególnej sytuacji. Sterowany algorytmem niedeterministycznym robot nie potrafi odnaleźć najkrótszej drogi w bardzo złożonym środowisku, mimo że dla człowieka może być ona oczywista. Jeżeli nie udaje się sformułować jasnego algorytmu rozwiązującego dany problem, można maszynę wyposażać w zdolność do samodzielnego uczenia się. Zagadnieniem tym zajmuje się dział określany, jako sztuczna inteligencja i heurystyka, czyli umiejętność wykrywania nowych faktów oraz znajdowania związków między faktami z wykorzystaniem hipotez.

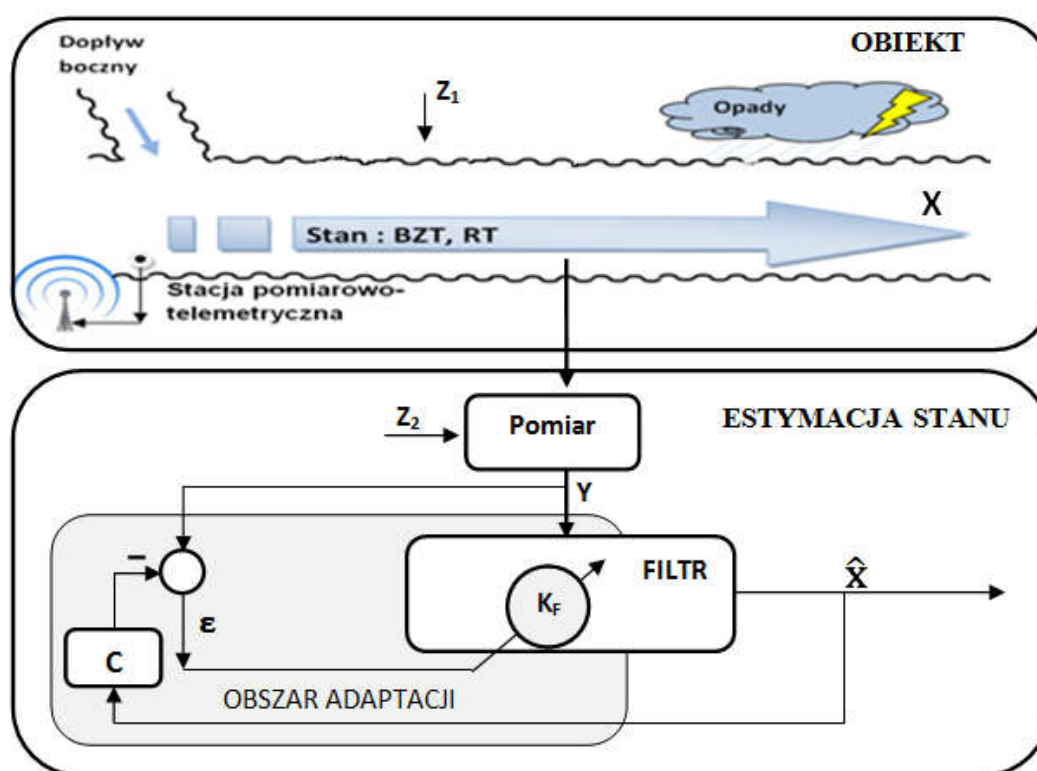
Algorytmy genetyczne - działanie opiera się na obserwacji natury i skopiowanie ich na grunt matematyki i informatyki. U podstaw algorytmów genetycznych znajduje się dobór naturalny oraz dziedziczność. Najlepiej przystosowane jednostki (niosące rozwiązania zbliżone do właściwego) są powielane oraz krzyżowane ze sobą w celu powielenia informacji. Bardzo wiele rzeczywistych problemów można rozwiązać w ten sposób.

Algorytmy kwantowe - algorytmy zaimplementowane na komputerach kwantowych, w odróżnieniu od komputerów elektronicznych opartych na bitach, mogą posługiwać się qubitami oraz zjawiskiem splątania. Na tego typu komputerach możliwy jest rozkład liczby

na czynniki pierwsze w czasie wielomianowym np. za pomocą algorytmu Shora. Problemem natomiast komputerów kwantowych jest de koherencja ich stanów –może dojść do utraty danych [52]. Metodę tą jednak można zastosować, gdy badany problem nie ma w ogóle rozwiązania analitycznego lub korzystanie z takich rozwiązań jest uciążliwe ze względu na ich złożoność (np. stosowanie eliminacji Gaussa zamiast wyliczania rozwiązań układu równań metodą wyznaczników jest stosowana, dlatego, że jest lepiej uwarunkowana numerycznie, a nie dlatego, że brak jest wzoru). Otrzymywane tą drogą wyniki są na ogół przybliżone, jednak dokładność obliczeń może być z góry określona i dobiera się ją zależnie od potrzeb [4], [16], [19].

5.2 Idea algorytmu adaptacyjnego wzmocnienia filtru generującego estymatę stanu

Adaptacyjność w proponowanym filtrze polega na modyfikacji współczynnika wzmocnienia K_F (struktura filtru podobna jest do filtru Kalmana) w każdej chwili czasowej dokonywania pomiaru w zależności od aktualnie wyznaczonej estymaty stanu. Realizacja korekty wzmocnienia dokonuje się bez znajomości zakłóceń obiektowych i pomiarowych, oraz ich charakterystyk, pomimo, iż istotnie wpływają one na wartości stanu i pomiarów.



Rys.5.1 Idea i mechanizm filtru adaptacyjnego z pomiarami zanieczyszczonej rzeki

X – wektor stanu

C – macierz pomiarowa

Y – pomiar

Z_1, Z_2 – zakłócenia systemowe i pomiarowe

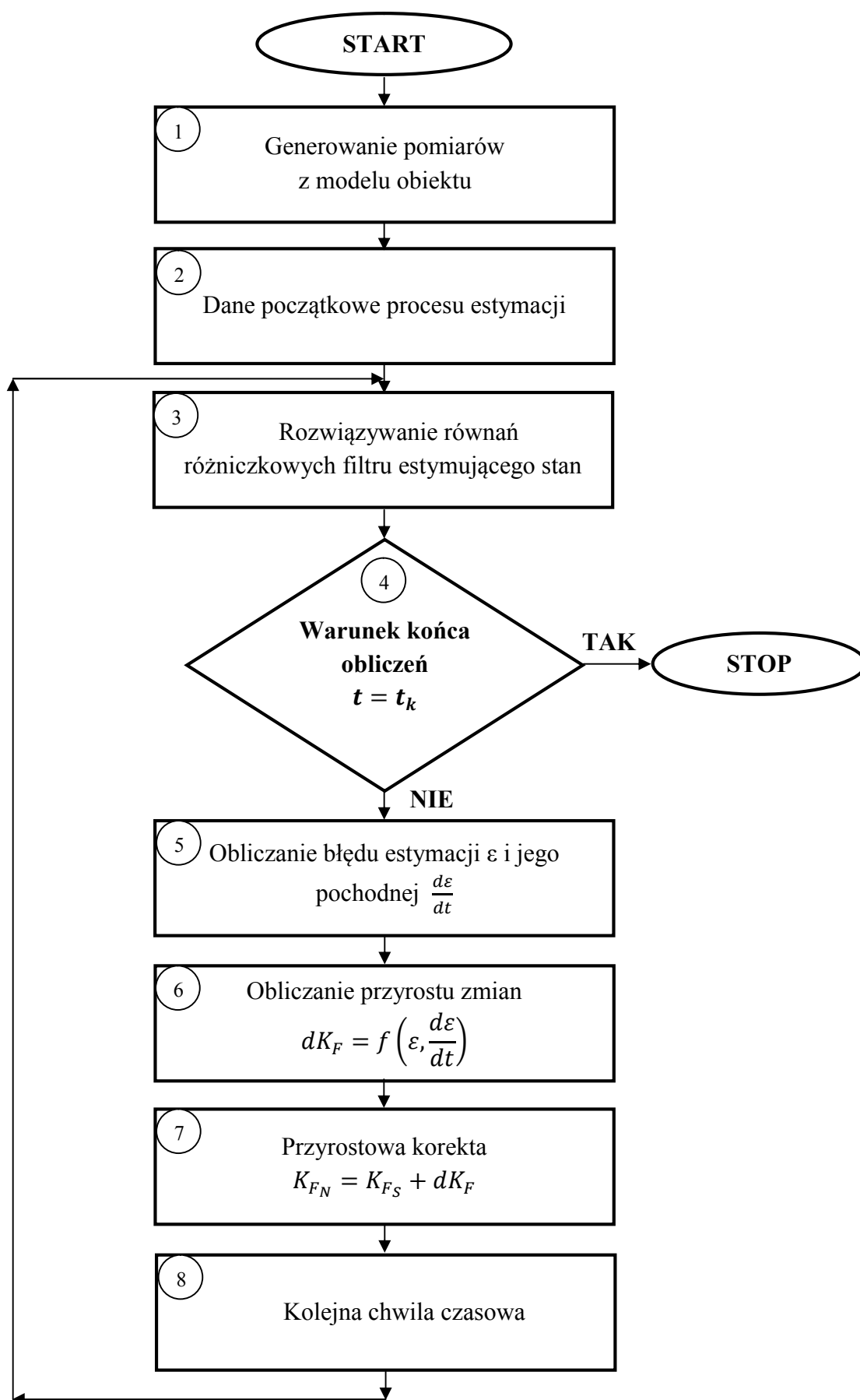
$\hat{X}$ – estymata stanu

K_F – współczynnik wzmocnienia filtru

Ilustracja 5.1 przedstawia ogólne podejście autorskie do rozwiązania postawionego zagadnienia określania wartości współczynnika wzmocnienia filtru metodą adaptacyjną.

Idea adaptacji polega na modyfikacji wzmocnienia filtra Kalmana K_F na podstawie różnicy pomiędzy pomiarem $y(t_k)$, a aktualną jemu odpowiadającą współrzędną estymaty stanu $\hat{x}(t_k)$. W tym podejściu dokonuje się ciągłej zmiany K_F zgodnie z napływem nowych pomiarów. Należy pamiętać jednak, iż modyfikacja K_F następuje przyrostowo tak jak korekta wag podczas uczenia w sieciach neuronowych. W proponowanym algorytmie zakłada się znajomość wartości początkowych wzmocnienia filtra (niezerowe wartości wzmocnienia), a jego modyfikacja następuje na podstawie tylko bieżących pomiarów i estymat [44]. Oznacza to, że adaptacja w algorytmie uwzględnia tylko aktualne pomiary (modyfikacja następuje w chwilach pomiarowych). Należy zauważyć, że mechanizm ten funkcjonuje w oparciu o sprzężenie zwrotne, w którym wartość estymaty jest wykorzystywana do aktualizacji wartości wzmocnienia filtra K_F oraz do wyznaczenia estymacji stanu. Realizuje się to w kolejnych krokach czasowych (zob. rys.5.2). W prezentowanym algorytmie pierwsze początkowe bloki dotyczą rozwiązywania zagadnienia estymacji stanu przy pomocy filtra. Kolejne etapy w algorytmie związane są z obliczaniem współczynnika wzmocnienia filtra metodą przyrostową. Precyzyjny opis wyznaczania błędu estymacji i jego pochodnej prezentuje blok 5 na rys.5.2. Podobnie prezentowane są bloki 6 i 7 na tym rysunku, których szczegóły będą podane w dalszej części opisu. Obliczenia są prowadzone dla każdego momentu pomiarowego. Koniec obliczeń ustala się w bloku decyzyjnym 4.

W proponowanym podejściu rozważany proces będzie dotyczył obiektu opisanego równaniami różniczkowymi zwyczajnymi z ciągłymi pomiarami reprezentujący stan zanieczyszczeń rzeki wykorzystując interpretację „wzdłuż charakterystyk”. Estymatę stanu wyznacza się z równania (4.11), w którym współczynnik wzmocnienia filtra K_F jest określany w sposób adaptacyjny. Ponadto zakłada się, że na rozważany proces reprezentujący stan zanieczyszczeń rzeki opisany modelem matematycznym oddziałują zakłócenia o charakterze stochastycznym, tzn. przyjmuje się założenie, że zarówno pomiar, jak i model obarczone są nieznanym sygnałem zakłócającym [37].



Rys.5.2 Adaptacyjny algorytm wyznaczania współczynnika wzmocnienia filtru

Aby zastosować ideę adaptacyjności posłużono się różnicą pomiędzy pomiarem, a współrzędną wektora estymaty stanu, w tym przypadku jest to wskaźnik rozpuszczonego tlenu RT.

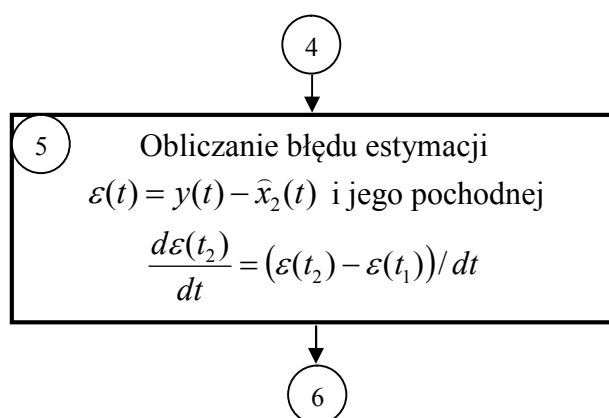
Błąd $\varepsilon_0(t)$ określono zależnością:

$$\varepsilon(t) = y(t) - \hat{x}_2(t) \quad (5.1)$$

gdzie: $y(t)$ – pomiar w chwili czasowej t , $\hat{x}_2(t)$ – estymata stanu wskaźnika RT.

Do obliczeń korekty wzmocnienia użyto również pochodnej błędu, który przyjmuje następującą postać:

$$\frac{d\varepsilon(t_2)}{dt} = (\varepsilon(t_2) - \varepsilon(t_1)) / dt, \quad t_2 > t_1 \quad (5.2)$$



Rys.5.3 Obliczanie błędu estymacji i jego pochodnej

Pochodna błędu pełni rolę rodzaju informacji o zachowaniu się błędu estymaty i pozwala stwierdzić, czy jego tendencja maleje czy rośnie w stosunku do momentu z poprzedniego pomiaru. Przyrost wartości współczynnika wzmocnienia dK_F przyjęto określać proporcjonalnie do aktualnego błędu ε , a korekty jego wartości dokonuje się jak w sieciach neuronowych metodą przyrostową zgodnie z zależnością:

$$K_{F_N} = K_{F_P} + \eta \ dK_F \quad (5.3)$$

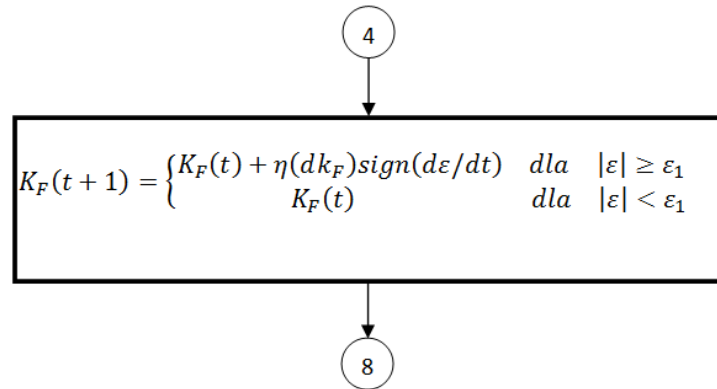
gdzie: K_{F_N} – nowa wartość współczynnika wzmocnienia filtru,

dK_F – przyrost wzmocnienia filtru,

K_{F_P} – wartość początkowa współczynnika wzmocnienia filtru

η – współczynnik ostrożności zmian

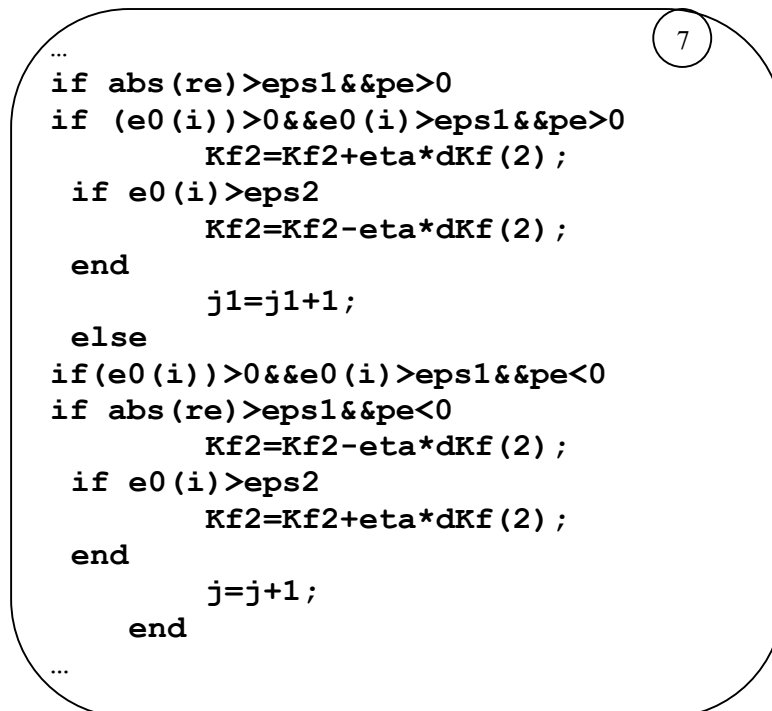
Ideę zmian wzmocnienia filtru reprezentują bloki 6 i 7 na schemacie podanym na rys.5.2. Szczegóły tych operacji podane zostały na rys.5.4.



Rys.5.4 Obliczanie przyrostu zmian wzmocnienia filtru i jego korekty

Dodatkowym elementem wpływającym na wartość wzmocnienia filtru jest współczynnik nazwany w tej pracy współczynnikiem ostrożności zmian określający, jaka część przyrostu ma być dodawana do wartości początkowej współczynnika wzmocnienia filtru. W algorytmie uwzględnia się ponadto zależność korekty wzmocnienia dK_F z pewnym „progiem” wartości błędu $\varepsilon(t)$.

Fragment programu realizujący zmiany wzmocnienia w zależności od wartości błędu i jego pochodnej podano na rys.5.5, który odpowiada blokowi 7 [14] przedstawionym na rys. 5.2.



Rys.5.5 Przyrostowa korekta wzmocnienia filtru

Korekta wartości K_F jest dokonywana w każdej chwili czasowej, w której dokonują się obliczenia z pewną ostrożnością stosując współczynnik η o wartościach z przedziału $(0...1)$. W przypadku dużych błędów ε przyjmuje się mniejsze wartości współczynnika ostrożności η , które wpływają na stabilność pracy algorytmu. Wartości η w algorytmie dobrano metodą eksperymentalną tabelaryzując zakresy błędów ε i współczynnika η . Sposób tabelaryzacji wynika z wiedzy eksperckiej.

5.3 Badania symulacyjne algorytmu dla różnych konfiguracji parametrów

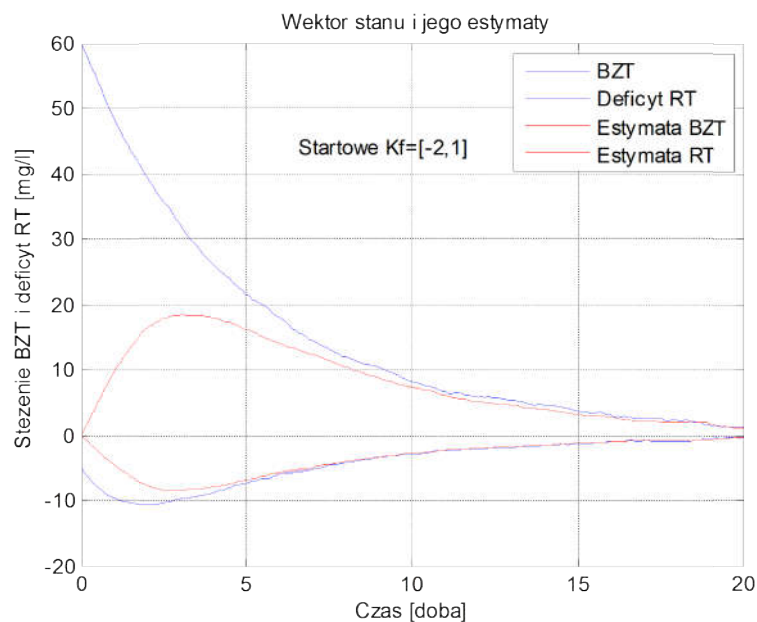
Badania realizowano symulując model matematyczny w postaci równań różniczkowych zwyczajnych. Reprezentują one rozważania zanieczyszczonej biochemicznie rzeki wzdłuż tzw. charakterystyk. Przyjęto, że wskaźnikami, jakości wody są BZT (Biochemiczne Zapotrzebowanie Tlenu) i RT (deficyt Rozpuszczonego Tlenu) wyrażone w jednostkach mg/l O_2 . Rozwiązanie równań różniczkowych realizowano algorytmem Rungego-Kutty, czwartego rzędu.

Jako założenia wstępne przyjęto warunki początkowe oraz oddziaływanie ciągłych wymuszeń interpretowanych, jako małe dopływy boczne rzeki. Zrealizowano to poprzez pseudolosowy sygnał o rozkładzie gaussowskim.

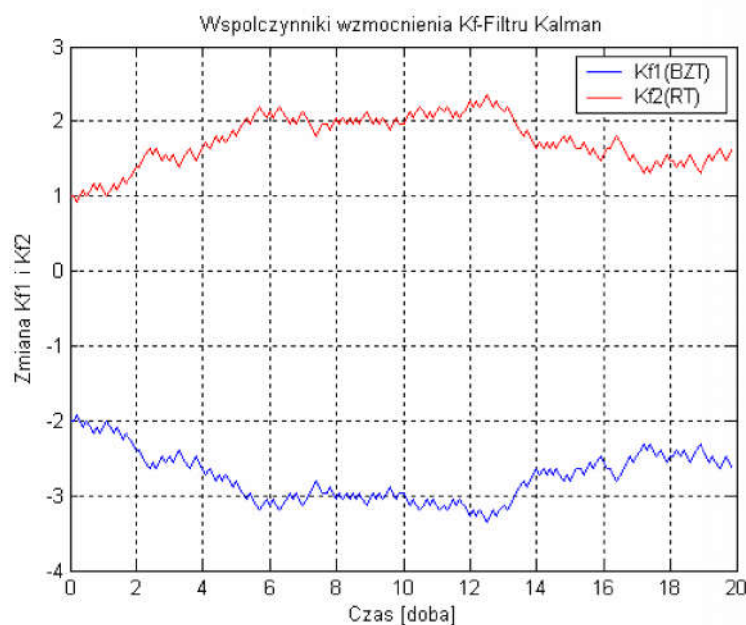
Przeprowadzone eksperymenty symulacyjne dokonano dla hipotetycznej rzeki z samooczyszczaniem. Ponadto przyjmowano różne wartości początkowe stanu $x(0)$ i współczynnika wzmocnienia K_F .

5.3.1 Warunki początkowe estymaty i współczynnika wzmocnienia filtru

Równania filtru generują estymaty, których przebiegi są zgodne ze zmianą wektora stanu. Ze względu na fakt, że dokonuje się pomiaru zmiennej stanu RT jej estymata szybciej i z mniejszym błędem podąża za jej zmianami, niż estymata stanu BZT. Pomimo małej wiedzy początkowej o estymacie filtr estymuje do wartości wygenerowanej z modelu matematycznego (zob. rys 5.6a, 5.8).



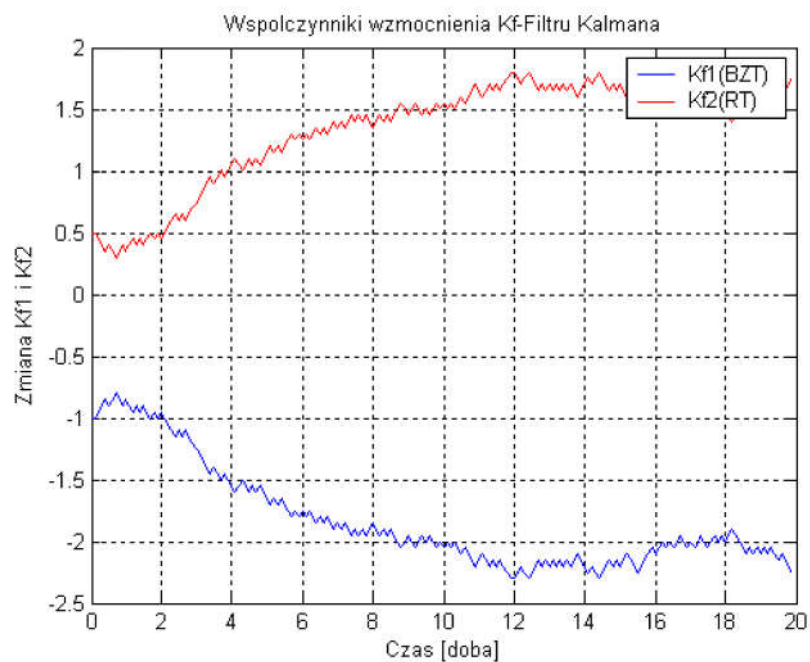
(a)



(b)

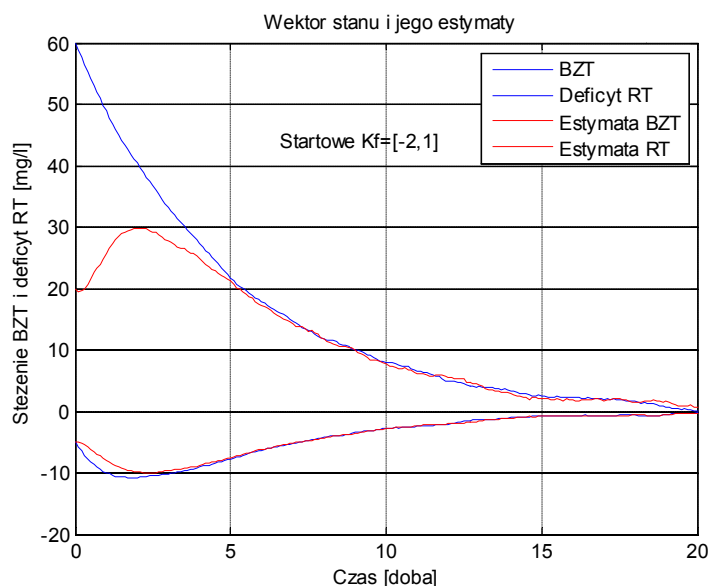
Rys.5.6 Wektor stanu i jego estymaty (a), oraz wartości współczynnika wzmocnienia filtra dla $\eta=0.8$, $\epsilon=0.01$ (b)

Dobór początkowych wartości współczynnika wzmocnienia może spowodować niewielkie jego zmiany (por. rys. 5.6b i rys. 5.7). Inne wartości startowe współczynnika wzmocnienia (jeśli są z tego samego zakresu) nie mają istotnego wpływu na rezultaty estymacji w dłuższym okresie.



Rys.5.7 Małe wartości początkowe współczynnika wzmocnienia filtra

Większa wiedza a priori o estymacji powoduje lepszą jej jakość (porównaj rys.5.6a i rys.5.8). Rozpoczynając proces z niezerowymi estymatami, znacznie skraca czas osiągnięcia małych błędów estymacji.

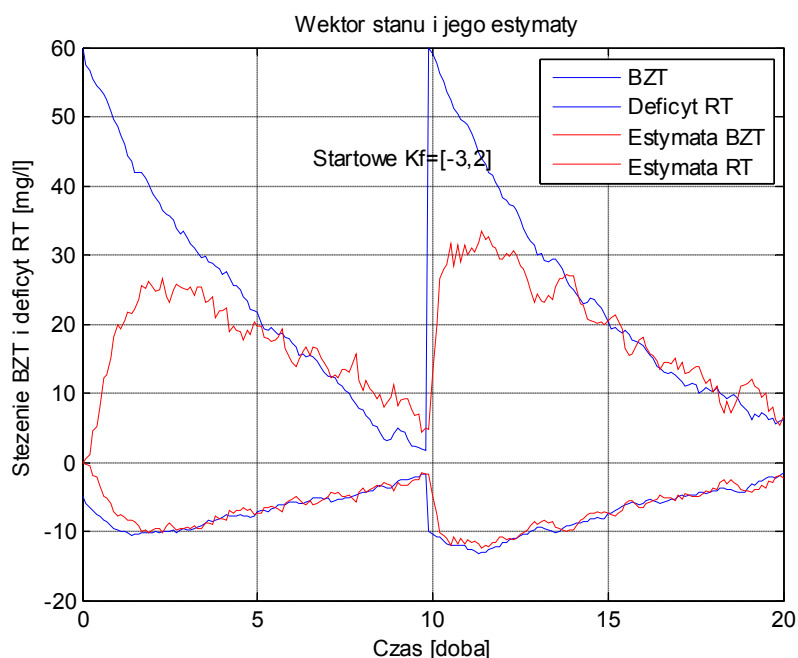


Rys.5.8 Niezerowe wartości startowe estymaty stanu

Powyższe rysunki 5.6-5.8 przedstawiają rezultaty badań, w których wartości współczynnika K_F były obliczane na podstawie wyznaczonego błędu określonego wzorem (5.1) oraz jego pochodnej (5.2) zgodnie z proponowanym algorytmem podanym na rys. 5.2.

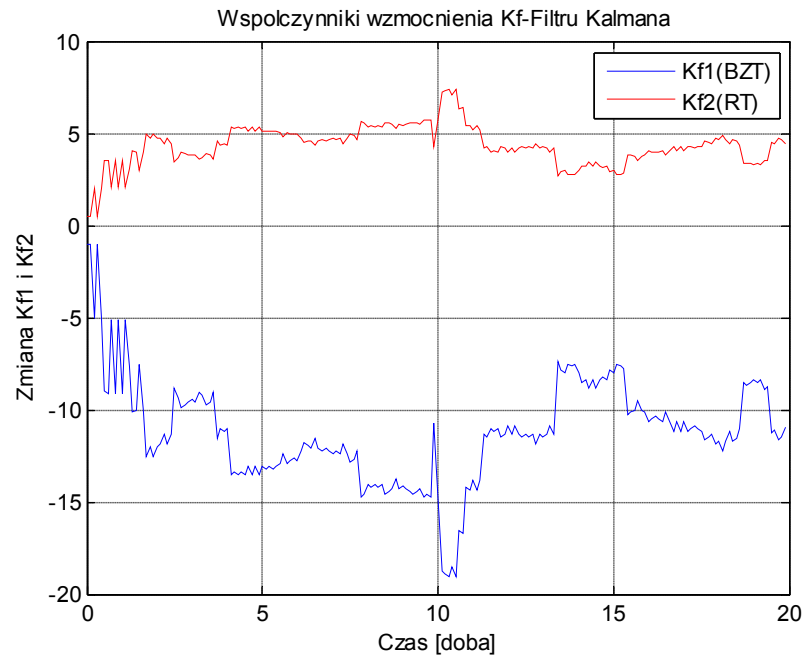
5.3.2 Zmiana współczynnika ostrożności filtru

W symulacjach badano estymaty zmodyfikowanym współczynnikiem K_F przyjmując różne wartości parametru ostrożności η oraz wartość „progu” błędu ϵ .

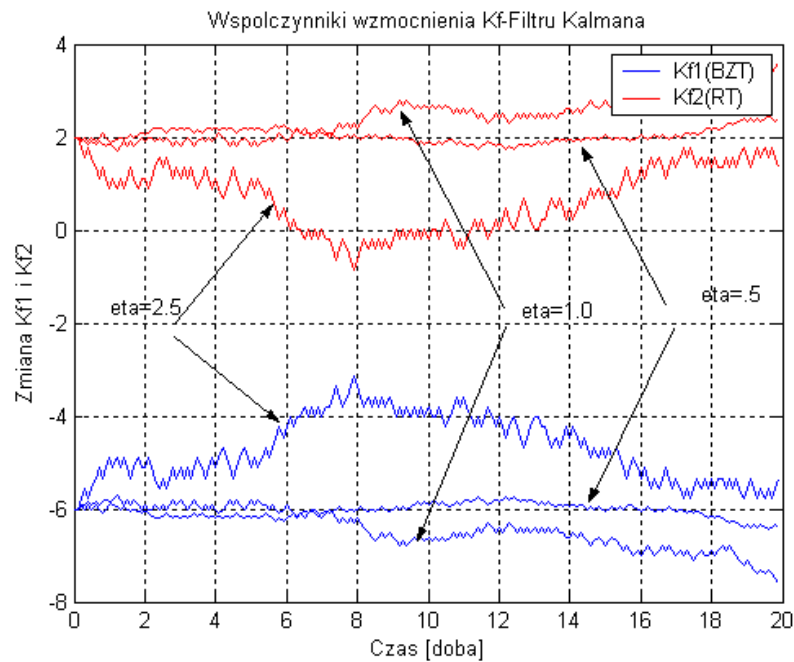


Rys.5.9 Przebieg estymat ze średnimi wzmocnieniami $K_F=[-3,2]$

Jak można zauważyć estymata mierzalnego wskaźnika zanieczyszczonej rzeki, jakim jest RT przebiega zgodnie z charakterystyką stanu tej współrzędnej. Natomiast druga współrzędna wektora stanu, jakim jest BZT jest niemierzalna, a jej estymata jest także zadowalająca i również podąża za jej stanem. Wyznaczony w trakcie obliczeń współczynnik wzmocnienia charakteryzuje się pewną dynamiką zależną od zmieniających się warunków funkcjonowania obiektu. Na rys. 5.9 w 10-tej dobie występują nagłe zmiany BZT i RT co „przenosi się” na reakcję zmian K_F w tym samym momencie (zob .rys. 5.10).



Rys.5.10 Przebieg wartości współczynników K_F w procesie adaptacji

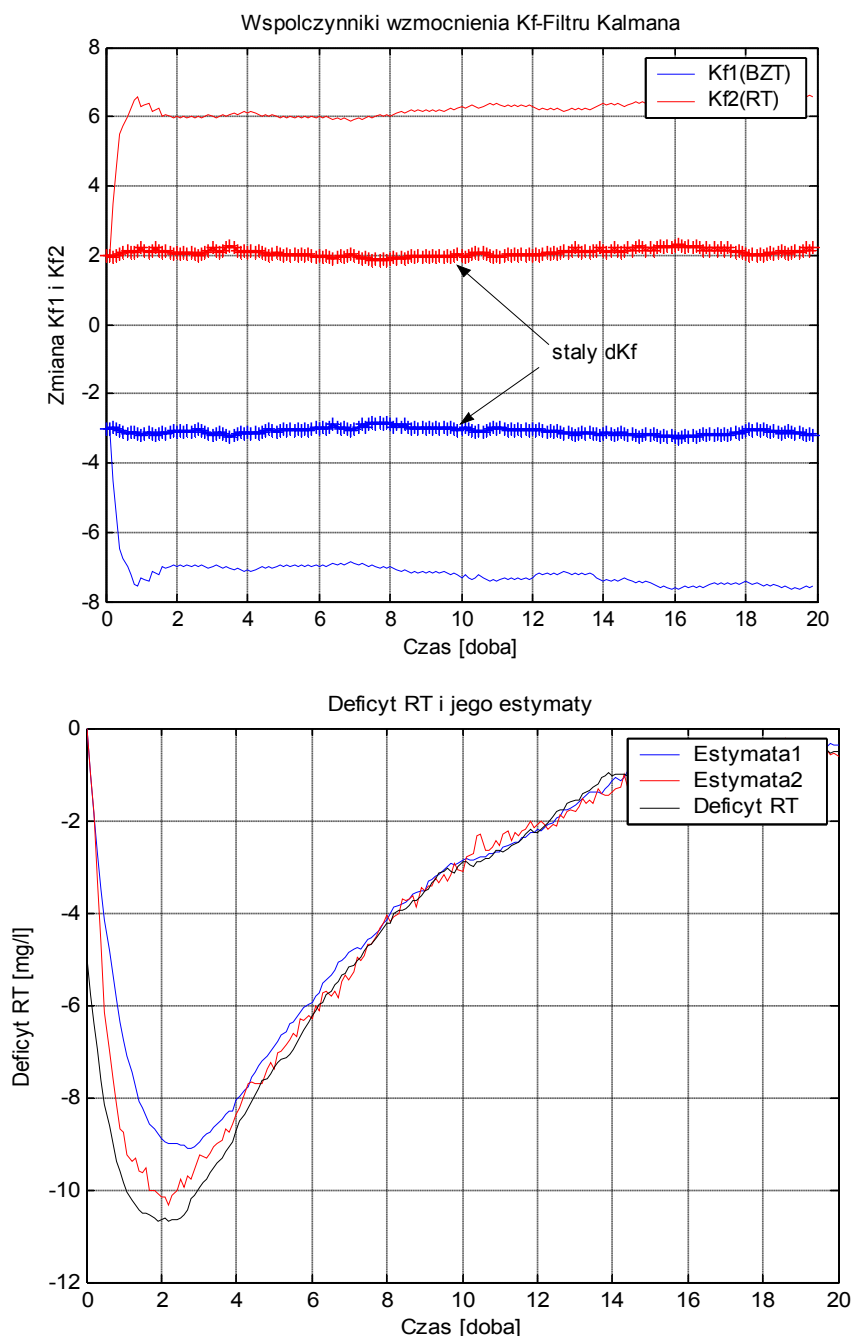


Rys.5.11 Współczynniki wzmocnienia K_F dla różnych wartości parametru η

Zmiana wartości błędu ϵ w algorytmie adaptacyjnym nie ma istotnego wpływu na rezultaty procesu adaptacji, ponieważ koniecznym jest, aby jego wartości były małe, czyli różnica pomiędzy pomiarem współrzędnej, a odpowiadającą estymatą była jak najmniejsza. Oczywiście skrajnie duże ϵ może doprowadzić do stałych wartości K_F . Rys. 5.11 przedstawia przebiegi K_F dla różnych współczynników η . Większe wartości η bardziej stabilizują zmiany K_F .

5.3.3 Warianty modyfikacji wzmocnienia filtru adaptacyjnego

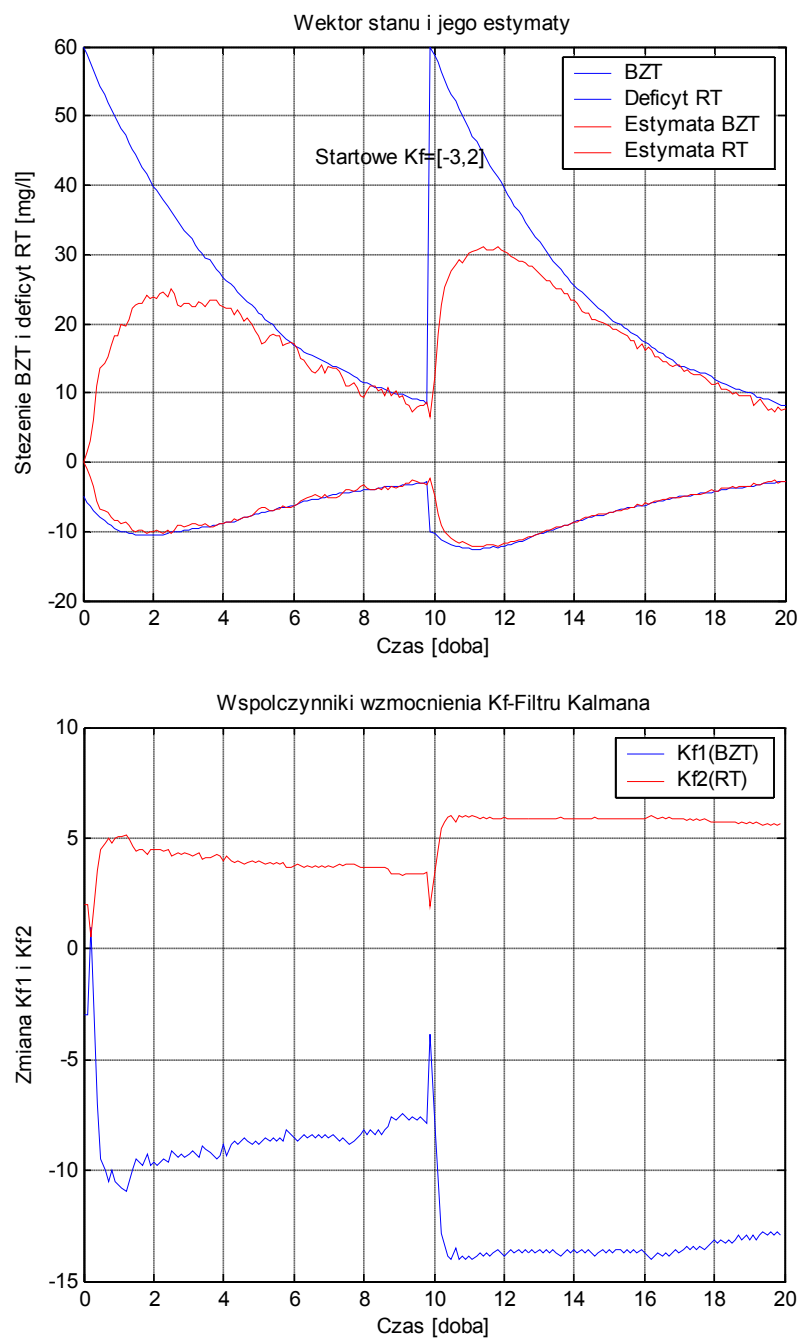
Proponowany algorytm umożliwia także wykorzystanie dynamicznego przyrostu zmian współczynnika K_F . Zmiana ta była uwarunkowana od dynamiki zmian błędu ε z zadana ostrożnością η .



Rys.5.12 Współczynniki K_F i współrzędna stanu RT oraz jej estymaty dla zmiennych dK_F

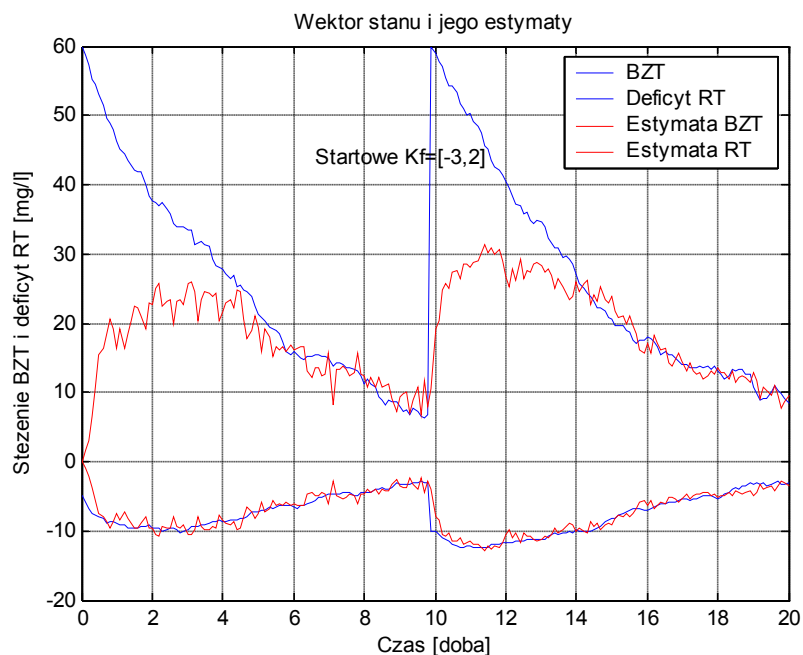
Dla dużych rozbieżności między estymatą, a stanem (pomiarami) dynamika zmian współczynnika jest zauważalna.

Symulacje dotyczyły także przypadków funkcjonowania symulowanego obiektu z bocznymi dopływami (zob. rys. 5.13).



Rys.5.13 Stan i estymata oraz wzmocnienie filtru dla rzeki z bocznym dopływem

Pomimo nagłych zmian wartości wektora stanu proces estymacji z adaptacyjnym doborem wzmocnienia filtru przebiegał poprawnie. Radykalne zmiany wzmocnienia są jego następstwem.

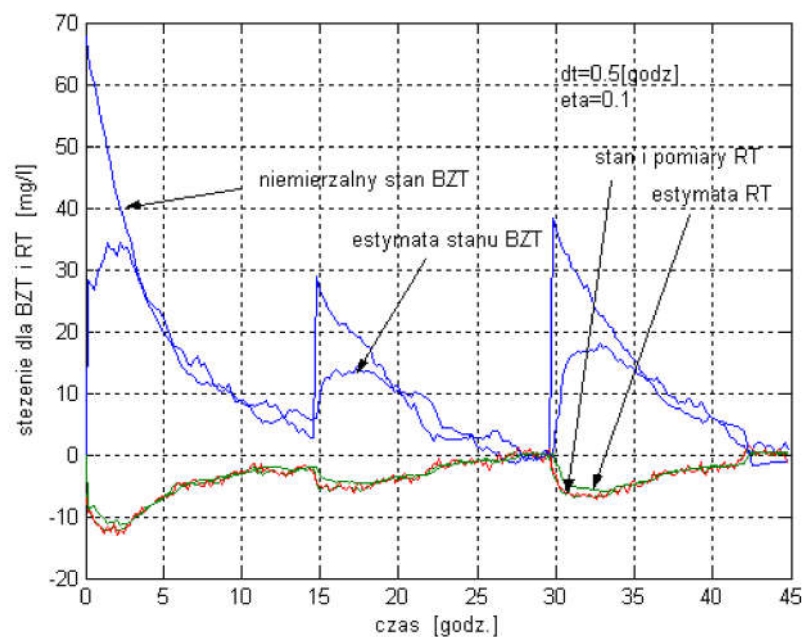


Rys.5.14 Stan i estymata w obecności dużych zakłóceń

Badano także funkcjonowanie algorytmu w obecności dużych zakłóceń (5 razy większe odchylenie standardowe niż poprzednio). Jak łatwo zauważyć uzyskano poprawne rezultaty rys. 5.14.

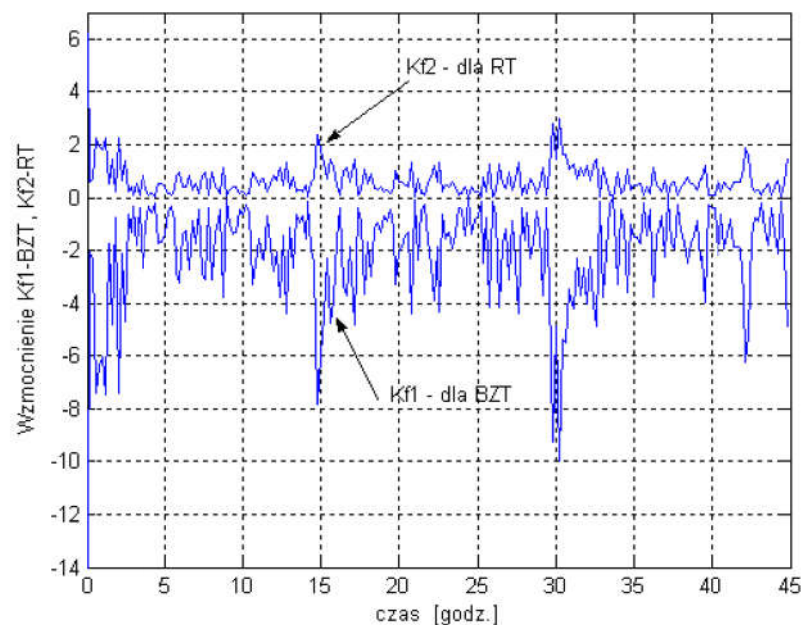
5.4 Walidacja działania algorytmu adaptacyjnego

Z przeprowadzonych badań symulacyjnych wynika, iż w każdym przypadku estymaty podążają za stanem utrzymując podobną charakterystykę zmian. Warto zauważyć, iż przebieg estymaty wskaźnika RT jest niemal identyczny jak jego stan. Jak wspomniano wcześniej wynika to z faktu, że pomiar dotyczy właśnie tego wskaźnika.



Rys.5.15 Przebiegi czasowe stanu i estymaty dla przypadku z bocznymi dopływami

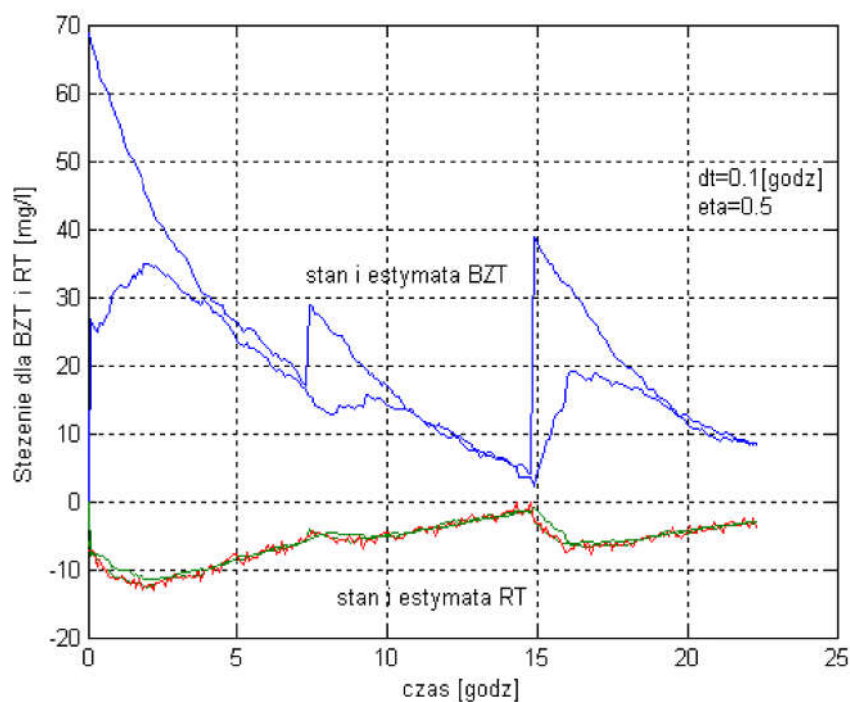
Nagle duże zmiany BZT należy traktować, jako zanieczyszczone duże boczne dopływy. Należy podkreślić, że pomimo braku informacji, o BZT filtr zdołał wygenerować jego estymatę, której tendencja zmian jest prawidłowa.



Rys.5.16 Przebiegi zmian adaptacyjnych współczynników wzmocnienia filtra

Dla przebiegów wektora stanu i jego, estymaty z rys.5.15 wzmocnienie filtra przyjmowało wartości zaprezentowane na rys.5.16. Duże wartości tego współczynnika w

chwilach początkowych i dla okolic 15 oraz 30 godz. obserwacji występują w miejscach dużych dopływów, tzn. tam gdzie następują nagłe zmiany zanieczyszczeń.



Rys. 5.17 Stan i estymaty dla przypadku częstych pomiarów

Badania symulacyjne wykonywano dla różnych parametrów, m. in. zmieniano współczynnik η oraz krok całkowania dt . Jednoczesne zwiększenie η i zmniejszenie dt nie powoduje istotnych zmian. Jednak dla dłuższego czasu obserwacji estymaty stanu są dokładniejsze, co daje się zauważyć poprzez m. in. większą wartość współczynnika wzmocnienia filtra.

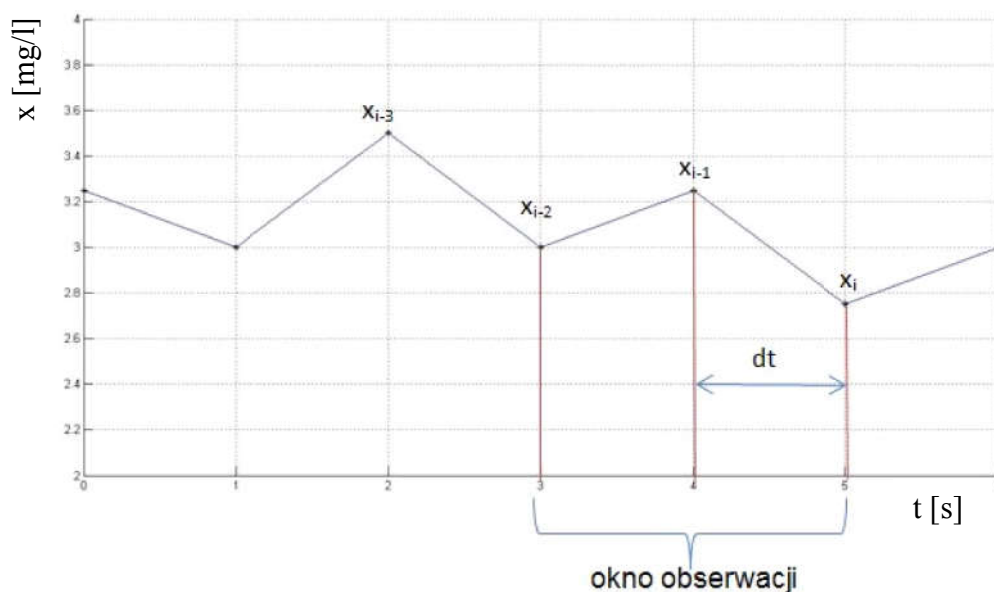
6. Rozszerzony adaptacyjny algorytm estymacji stanu

Badania w rozdziale tym dotyczą adaptacyjnego algorytmu estymacji stanu z uwzględnieniem ograniczonego horyzontu czasowego historii pomiarów. Idea adaptacji polegała na modyfikacji współczynnika wzmocnienia filtru estymującego ze szczególnym uwzględnieniem wpływu pomiarów z jego wcześniejszych chwilach. Ponadto przyjęto współczynniki proporcjonalności k_p przyrostu wzmocnienia filtru dK_F indywidualnie dla współrzędnych wektora stanu BZT-RT (np. dla BZT $dK_{FBZT} = k_{pI} \varepsilon$). Obiektem, który posłużył do badań symulacyjnych był model matematyczny zanieczyszczonej biochemicznie rzeki długiej posiadającej dopływy boczne. W ramach badań model poddany był wymuszeniom w postaci zakłóceń stochastycznych o rozkładzie gaussowskim. Rozszerzony algorytm został zbadany oraz porównany z algorytmem wykorzystującym tylko bieżące pomiary. Otrzymane wyniki zaprezentowane w tej części wskazują potrzebę wykorzystania okna obserwacji w celu poprawy, jakości estymacji stanu. Jakość ta wymuszana jest zmiennym w czasie współczynnikiem wzmocnienia filtru. Estymata generowana jest tak jak w poprzednich rozdziałach, a wpływ okna obserwacji przejawia się w szybkości odpowiedzi algorytmu na zmiany wektora stanu oraz małymi błędami estymacji.

6.1 Innowacja algorytmu adaptacyjnego z zadaniem horyzontem obserwacji

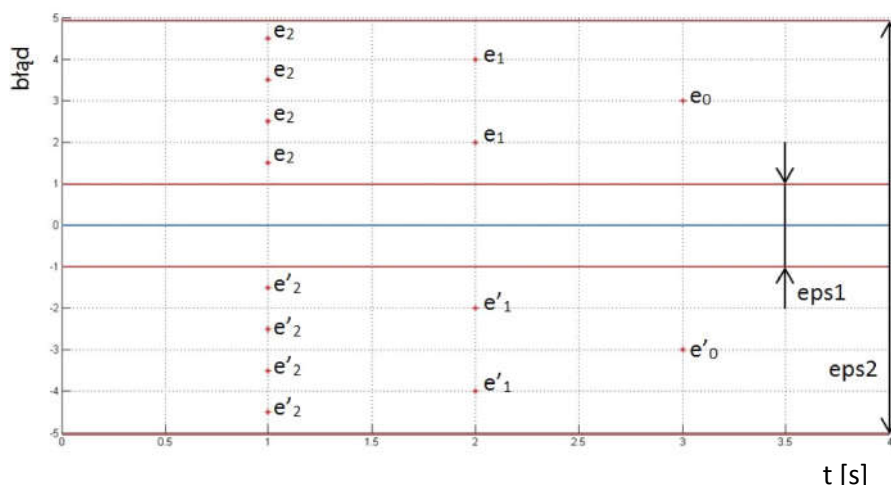
Podjętym zadaniem w tej pracy było zaprojektowanie i stworzenie adaptacyjnego mechanizmu tworzącego estymatę stanu z wykorzystaniem niezerowego horyzontu czasowego. Jedną z idei ulepszenia mechanizmu adaptacji jest wykorzystanie poprzednich pomiarów nazwanych, jako horyzont obserwacji. Uwzględniając jednocześnie zwiększoną ilość pomiarów, spowoduje, iż algorytm będzie funkcjonował jeszcze precyzyjniej.

Horyzontem czasowym (obserwacji) lub polem (oknem) czasowym będziemy nazywać przedział czasowy, w którym przeprowadzane są pomiary uwzględniane w działaniu algorytmu estymacji i wykorzystywane w jednej pętli obliczeń algorytmu.



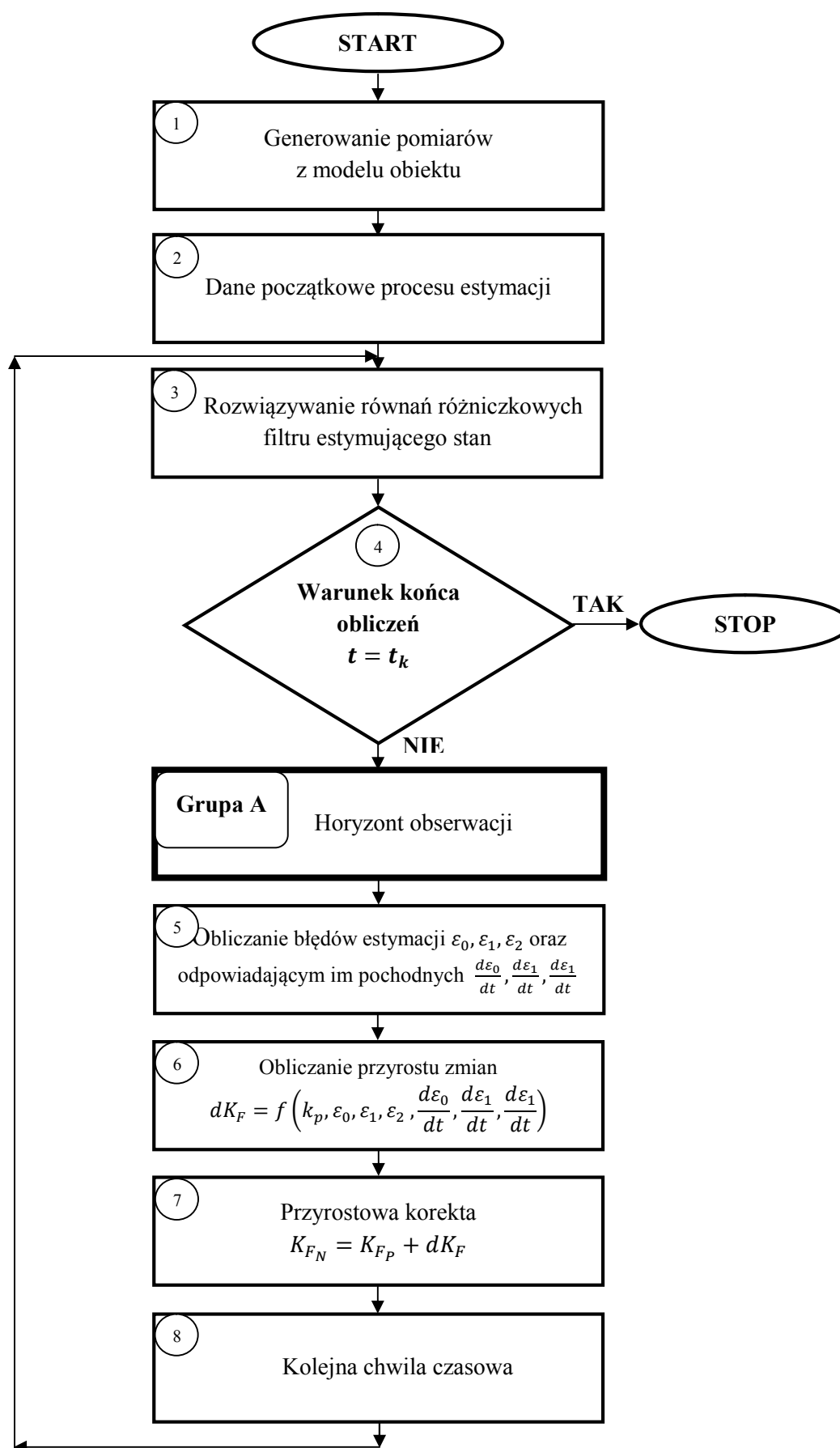
Rys. 6.1 Horyzont obserwacji dla chwili 5

Okno obserwacji ma za zadanie wykorzystać informacje zawarte we wcześniejszych pomiarach. Badanie tego zachowania polega na wyznaczeniu błędu estymacji w konkretnych chwilach czasowych. Wiadomość o zmianie wartości błędu w stosunku do poprzedniego kroku będzie wpływała na działanie algorytmu poprzez konkretną zmianę wartości współczynnika wzmocnienia.



Rys. 6.2 Okno obserwacji z możliwymi położeniami błędów estymacji. e_i , e'_i – błędy estymacji odpowiednio większe i mniejsze od zera, eps_1 – dolna granica błędu estymacji (dozwolona wartość błędu), eps_2 – górna granica błędu estymacji

Rozszerzenie horyzontu, czyli uwzględnienie większej ilości pomiarów do wyznaczania korekty wzmocnienia dK_F zwiększa precyzję obliczeń. Mechanizm pozwala określić wartości błędów poprzednich pomiarów oraz sprawdzić tendencje ich zmian rys. 6.2. Dla każdej chwili pomiarowej dokonuje się poszukiwania wartości minimum błędu optymalizując dobór wartości współczynnika filtru K_F .



Rys. 6.3 Adaptacyjny algorytm z zadany horyzontem obserwacji

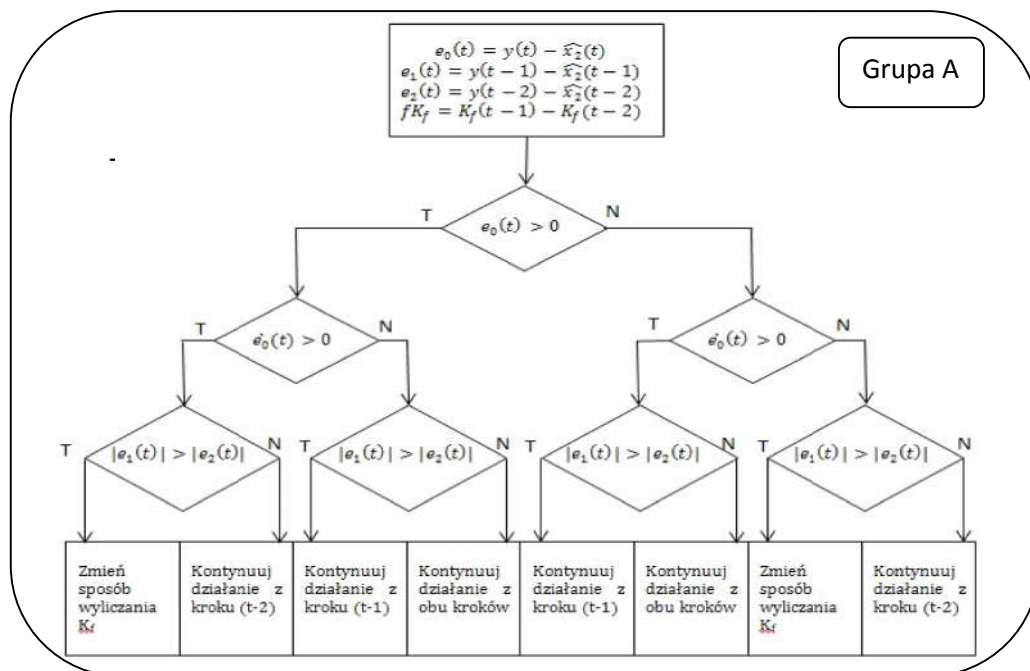
Zależności prezentowane na rys. 6.1 – 6.2 stanowią elementy kompletnego mechanizmu estymacji stanu z oknem obserwacji. Schemat ogólny przedstawiający działanie programu został zawarty w rysunku 6.3.

Istotą w algorytmie jest to, że wykorzystuje się wprowadzone okno obserwacji tylko w momencie, gdy błąd estymacji jest większy od przyjętej progowej granicy błędu. W przypadku, gdy błąd ten jest mniejszy bądź równy tej granicy algorytm nie zmienia wartości wzmocnienia filtra.

Szczegółowe postępowanie jest następujące:

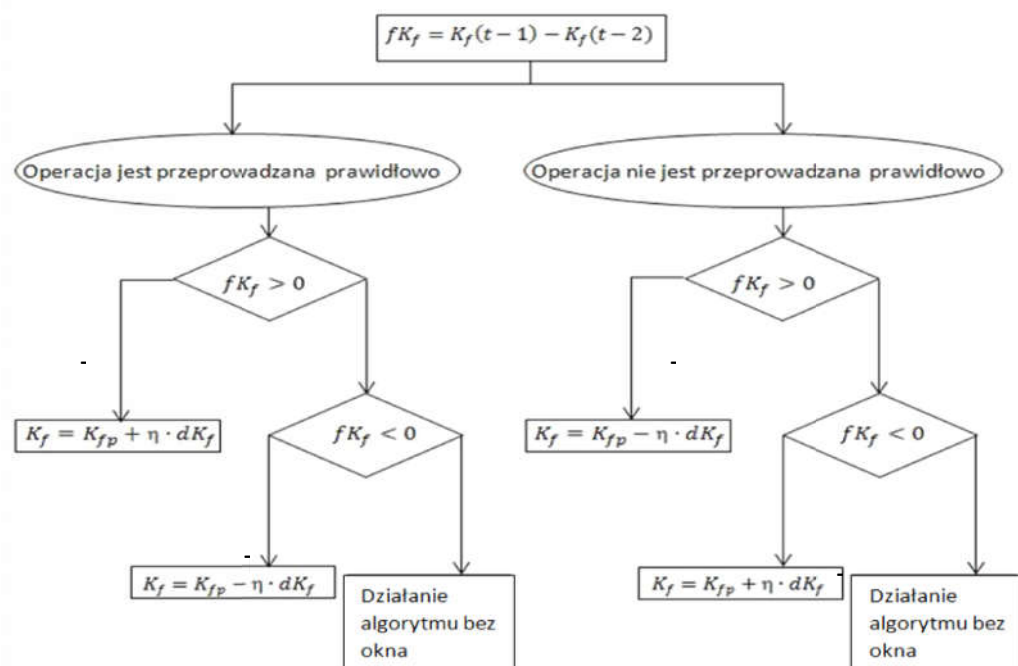
Algorytm rozpoczyna swoje działanie od sprawdzenia czy wartość błędu w bieżącej chwili czasowej jest większa od zera. Następnie sprawdza czy wartość pochodnej błędu w chwili bieżącej jest większa od zera. Jeżeli zarówno wartość błędu i jego pochodna spełniają te same warunki (są razem większe lub razem mniejsze od zera) to oznacza to, że wartość estymaty oddala się od wektora stanu (błąd estymacji rośnie). Następnie algorytm sprawdza czy wartość bezwzględna błędu estymacji w chwili czasowej $i-1$ jest większa od wartości bezwzględnej błędu w chwili czasowej $i-2$, gdzie i oznacza bieżącą chwilę czasową. Spełnienie tego warunku oznacza, że algorytm nie poprawił swojego działania i należy podjąć inne kroki w celu zmniejszenia wartości błędu. W przypadku, gdy wartość bezwzględna błędu estymacji z chwili czasowej $i-1$ jest mniejsza od wartości bezwzględnej błędu z chwili czasowej $i-2$ to przeprowadzona jest zmiana znaku przyrostu dK_F na przeciwny. Jeżeli wartość błędu i jego pochodna posiadają różne warunki to estymata przybliża się do wektora stanu, co oznacza, że operacja przeprowadzana jest w prawidłowo i nie jest konieczne wprowadzanie zmian do działania filtra.

Całość działań algorytmu stosującego horyzont obserwacji obrazuje rysunek 6.3, na którym przedstawiono odpowiadającego za realizację okna obserwacji fragment schematu blokowego (**Grupa A**) szczegółowy schemat tej grupy przedstawia rys. 6.4.



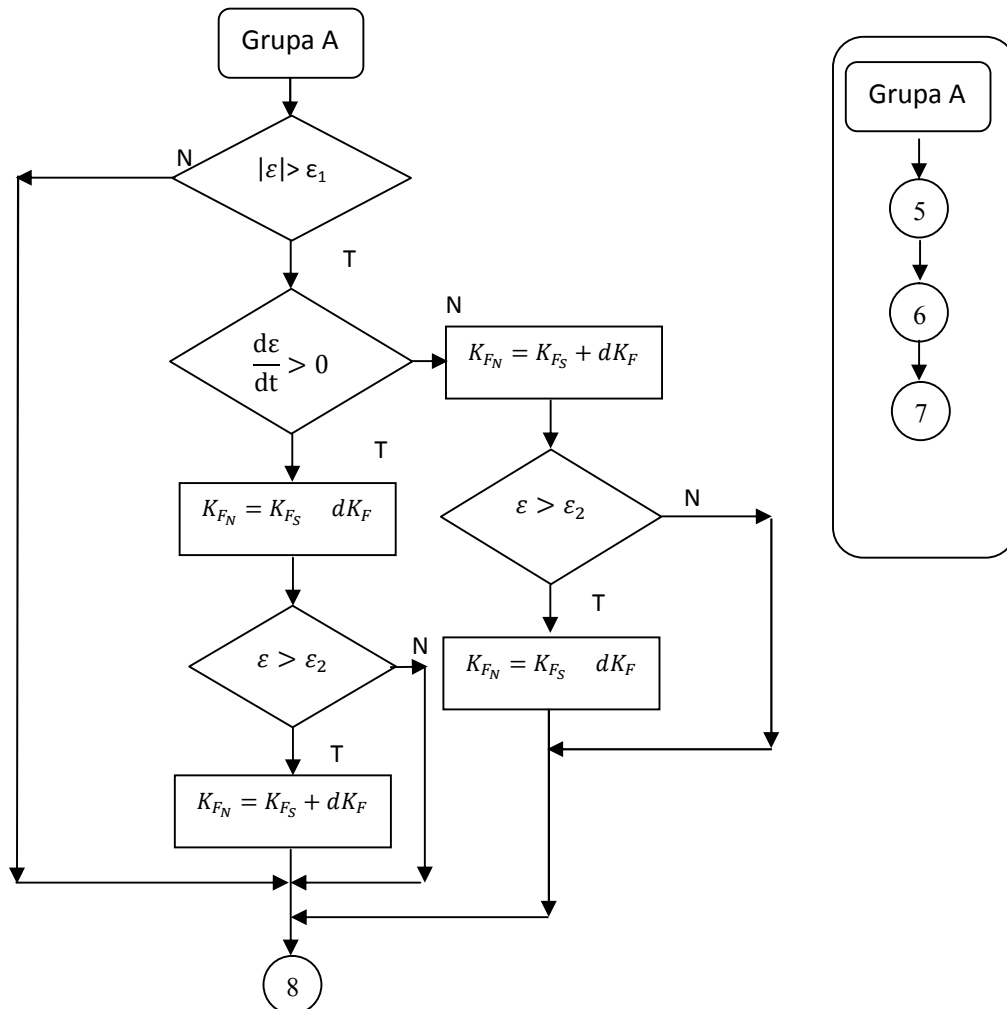
Rys.6.4 Schemat działania okna obserwacji

Po sprawdzeniu działania algorytmu, program rozpoczyna operację sprawdzania jak zmienił się współczynnik wzmocnienia w filtrze w zadanej chwili czasowej rozpatrywanej w horyzoncie obserwacji. Do tego celu wykorzystywany jest algorytm rozpoznający czy wartość współczynnika wzmocnienia K_F filtra wzrosła, zmalała czy też nie zmieniała swojej wartości. Po sprawdzeniu założonych warunków następuje przeprowadzenie operacji zmiany wartości wzmocnienia filtra wykonywane według schematu (rys. 6.5).



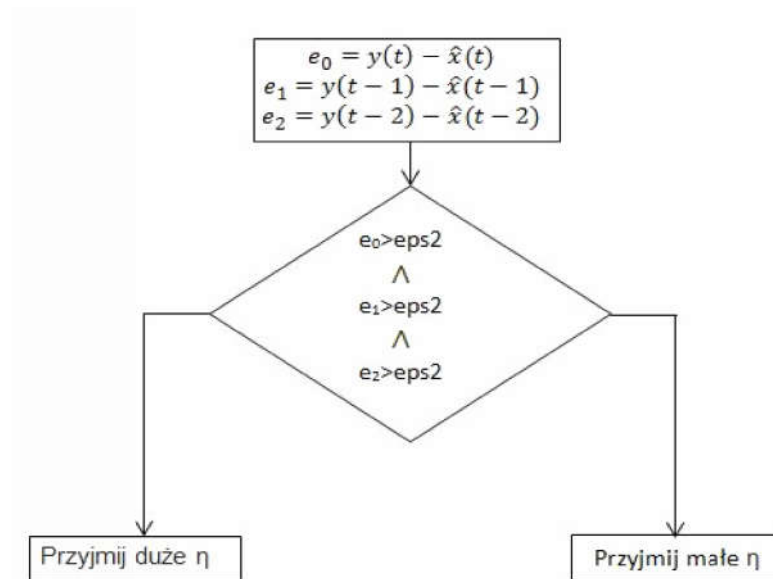
Rys. 6.5 Schemat działania algorytmu dokonującego zmiany wzmocnienia w filtrze

Algorytm przedstawiony na schemacie rys.6.4 wykonuje działania zmiany K_F jedynie, gdy w przynajmniej jednej chwili czasowej sprawdzanej w oknie obserwacji błąd estymacji nie rośnie. W przypadku, gdy błąd ε rośnie w przeciągu dwóch chwil czasowych następuje wykonywanie działań według schematu na rysunku 6.6 jednak z pominięciem współczynnika ostrożności zmian.



Rys. 6.6 Schemat działania algorytmu sprawdzającego zmiany współczynnika wzmocnienia

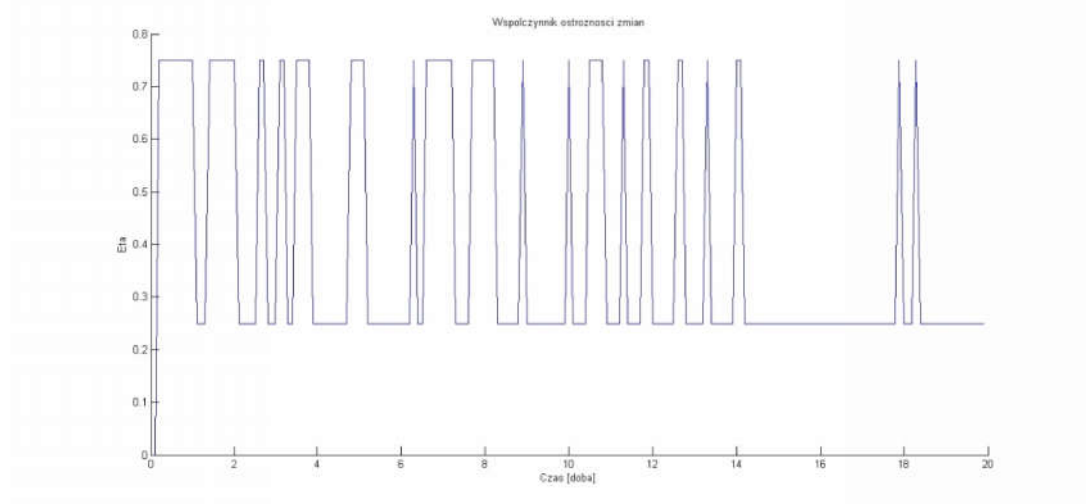
Do mechanizmu estymacji stosującego okno obserwacji została dodana opcja zmiennego współczynnika ostrożności zmian K_F (rys.6.7).



Rys.6.7 Schemat algorytmu zmiany współczynnika ostrożności zmian:

eps2 – górna granica błędu estymacji, η – współczynnik ostrożności zmian

W przypadku, gdy spełniony jest warunek mówiący, że pomiary błędu estymacji z trzech chwil czasowych są większe od założonej górnej granicy błędu estymacji, następuje ustawienie dużej wartości współczynnika ostrożności zmian w celu przyspieszenia reakcji programu na nieprawidłowe wyniki. Gdy warunek ten nie jest spełniony następuje ustawienie małej wartości współczynnika ostrożności zmian, aby ograniczać wahnięcia estymaty.



Rys. 6.8 Warianty współczynnika ostrożności zmian podczas działania programu

Rysunek 6.8 przedstawia jak współczynnik ostrożności zmian η zmieniał swoją wartość w trakcie działania programu. Wykorzystując podany wykres można zauważyć, w których chwilach czasowych pojawiały się większe błędy estymacji – współczynnik ostrożności zmian przybierał wtedy wartość duże (0,75).

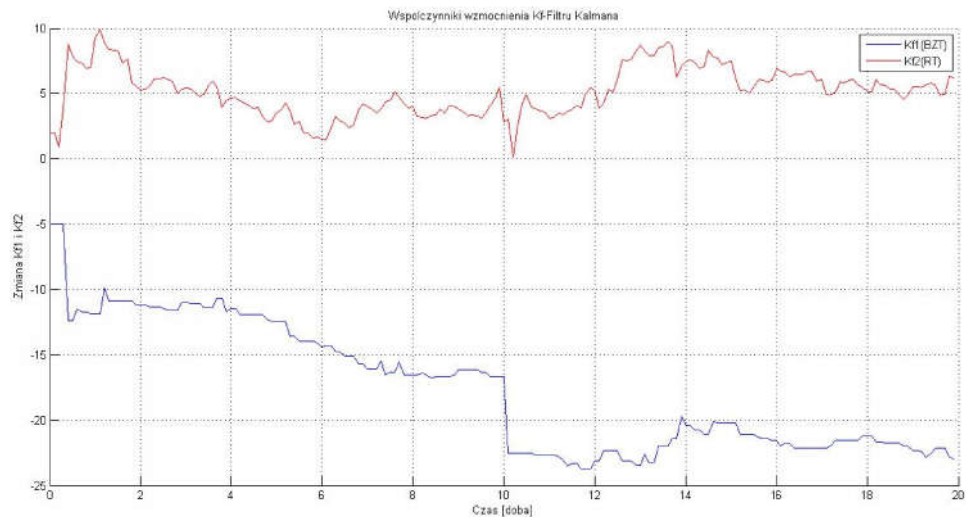
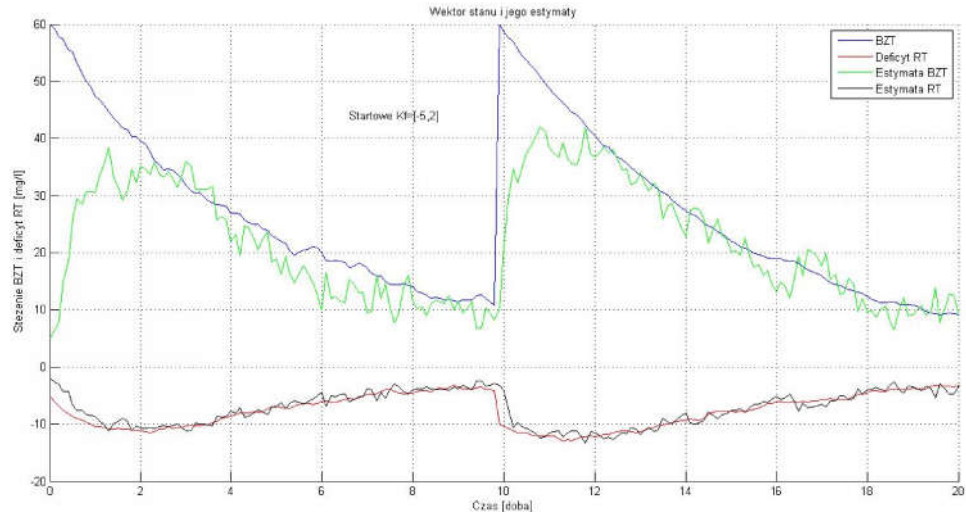
6.2 Badania symulacyjne algorytmu z określonym oknem czasowym

W celu sprawdzenia słuszności stosowania algorytmu wykorzystującego horyzont obserwacji zostały przeprowadzone badania określające, w jaki sposób przebiega proces tworzenia estymaty stanu. Obiektem badań algorytmu jest model zanieczyszczonej biochemicznie rzeki (wzór 3.2). Szybkość reakcji samooczyszczania tej rzeki została przedstawiona w postaci macierzy stanu $A = \begin{bmatrix} -k_1 & 0 \\ -k_2 & -k_3 \end{bmatrix}$. Zarówno intensywność dopływu zanieczyszczeń jak i zakłócenie pomiaru zostały przedstawione, jako szum o rozkładzie gaussowskim, przez co każda symulacja przedstawia inne rezultaty. Takie podejście powoduje, że wyniki symulacji są przybliżone do warunków rzeczywistych.

Przykład A

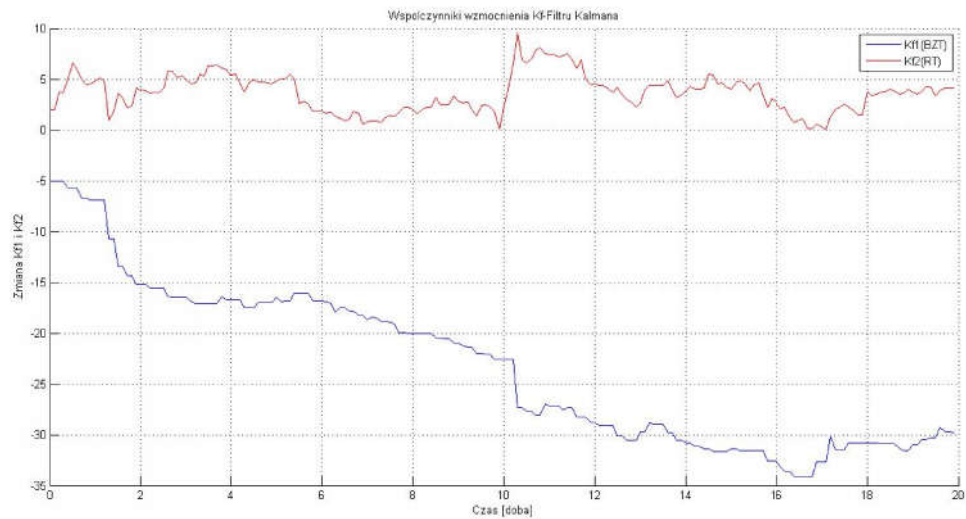
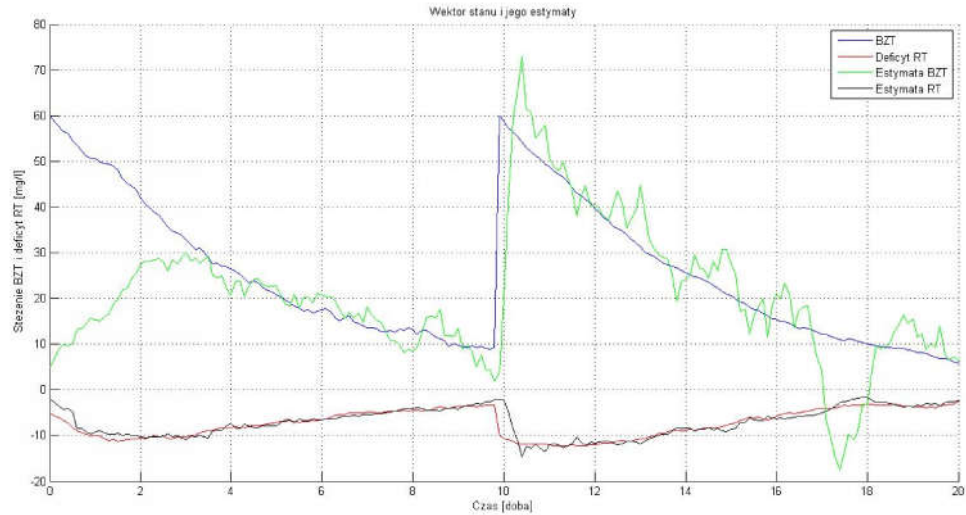
Badania przeprowadzono dla następujących warunków: $x = [60; -5]$ – początkowy wektor stanu, $\hat{x} = [5; -2]$ – estymata stanu, $K_F = [-5; 2]$ – współczynnik wzmocnienia filtru, $k_p = [5; 1]$ – indywidualny współczynnik proporcjonalności zmian wzmocnienia dK_F zwany „regulatorem indywidualnym”, $\text{eps1} = [0.001]$ – dolna granica błędu estymacji, $\text{eps2} = [1.0]$ – górna granica błędu estymacji. Współczynnik ostrożności zmian zgodnie ze schematem rys. 6.8 mógł przyjmować wartości 0.75 lub 0.25. Wartości te uznaje się za domyślne do prowadzenia badań.

Badania zostały przeprowadzone dla czasu odpowiadającemu 20-tu dobom przy założeniu wykonywania 10-ciu pomiarów na dobę. Przyjęto, że badana rzeka posiada dopływ boczny pojawiający się w czasie 10 doby.



Rys.6.9 Przebiegi sygnałów w algorytmie z mechanizmem estymacji wykorzystującym okno obserwacji

Przeprowadzona symulacja wygenerowała bardzo obiecujące wyniki rys.6.9. Estymata jest porównywalna do wektora stanu. Osiąga w bardzo szybkim tempie wartości z pobliża wektora stanu. Współczynnik wzmocnienia filtru zmienia się w sposób proporcjonalny do zapotrzebowania estymaty na zmianę. W przypadku, gdy różnica pomiędzy estymatą a stanem jest większa filtr przyjmuje większe wartości K_F , aby zniwelować tę różnicę. Gdy różnica pomiędzy estymatą a wektorem stanu maleje współczynnik wzmocnienia obniża swoją wartość.

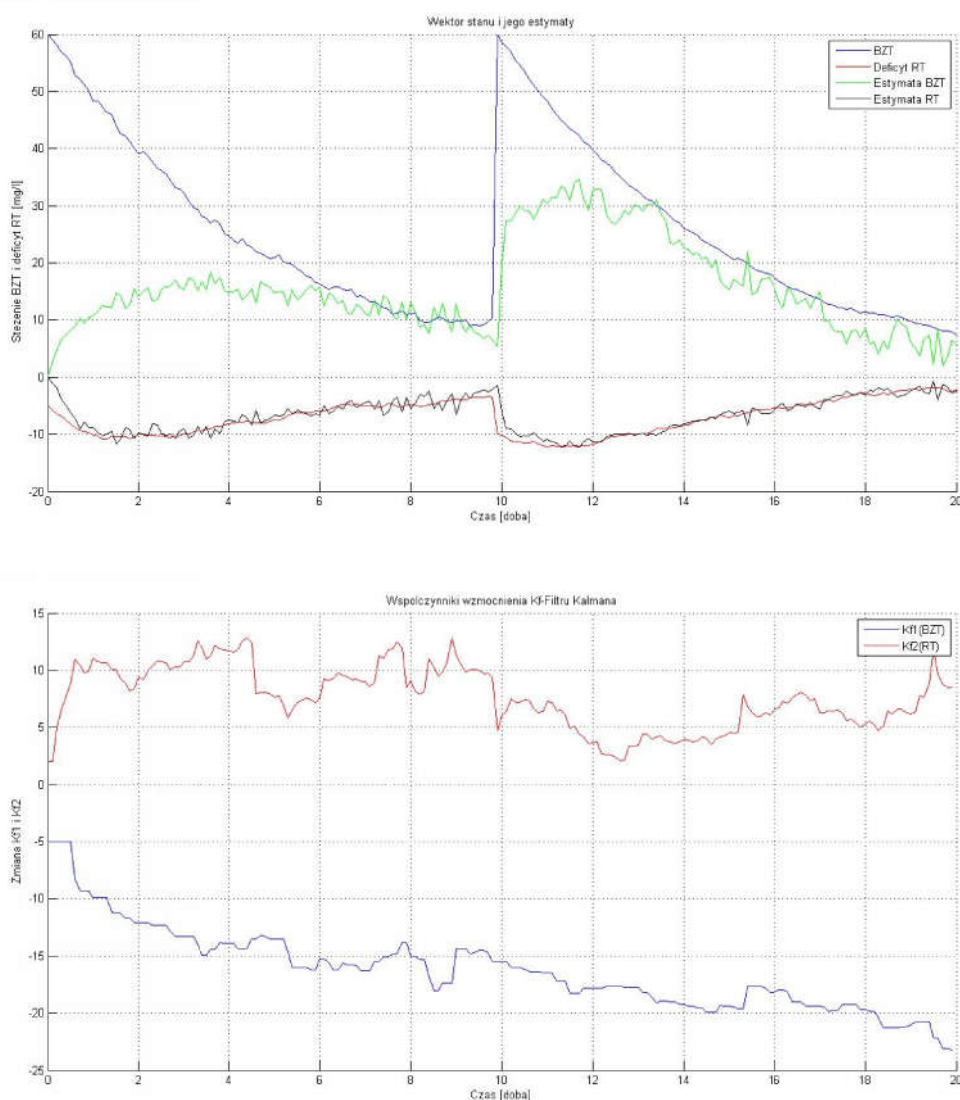


Rys.6.10 Charakterystyki działania mechanizmu estymacji wykorzystującego horyzont obserwacji

Przedstawione wyniki rys.6.10 zostały również przeprowadzone dla domyślnych wartości początkowych. Uzyskano również estymatę podążającą za wektorem stanu. Jednak realizacja estymat przebiegała dla innych niż poprzednio wartości współczynnika wzmocnienia filtru K_F . Powodem tych zmian była losowa wartość zakłócenia. Była ona również przyczyną chwilowego błędu estymacji.

Przykład B

Badania te zostały przeprowadzone w warunkach zmienionej wartości początkowej estymaty. Została ona ustawiona na poziomie równym zero (zob. rys. 6.11).

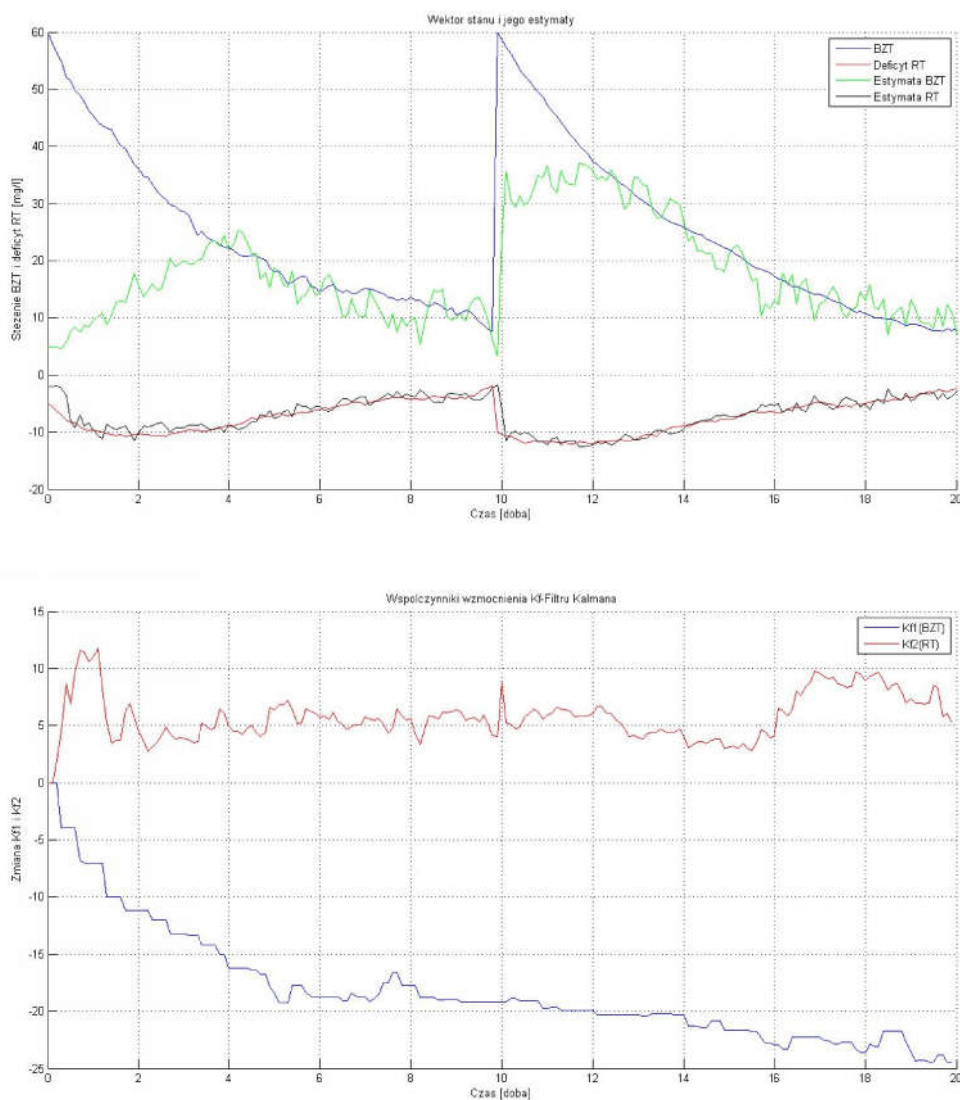


Rys. 6.11 Przebiegi działania mechanizmu estymacji wykorzystującego horyzont obserwacji z zerowymi wartościami początkowymi wzmocnienia K_F

Zadanie zerowej wartości początkowej estymaty nie spowodowało błędnego działania algorytmu. Można przez to stwierdzić, że program jest w stanie przeprowadzić prawidłowy proces estymacji stanu bez konieczności ustawiania wartości początkowej estymaty. Jednak im wartość początkowa estymaty ustawiona na poziomie bliższym wektorowi stanu tym wygenerowana, estymata szybciej (w krótkim czasie) zbliża się do wektora stanu.

Przykład C

Trzeci przykład działania programu przedstawia wyniki estymacji przeprowadzone, gdy początkowa wartość współczynnika wzmocnienia filtra K_F była zero (zob.rys.6.12).

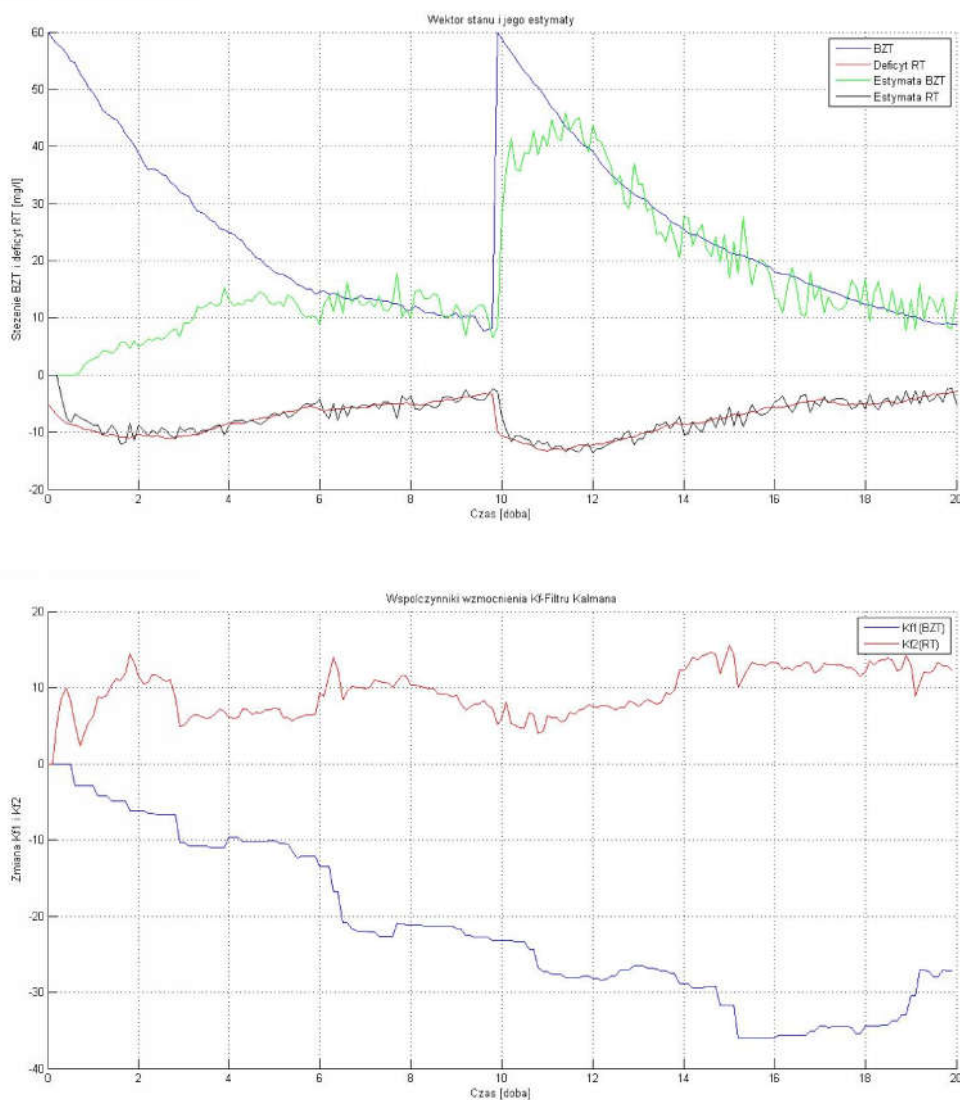


Rys. 6.12 Charakterystyki mechanizmu estymacji wykorzystującego horyzont obserwacji z zerowymi wartościami współczynnika wzmocnienia filtra

Mimo ustawienia wartości współczynnika wzmocnienia filtra na poziomie zera algorytm był w stanie prawidłowo wygenerować estymaty. W prezentowanym przypadku estymata BZT w początkowym okresie bardziej zbliża się do jego stanu niż w poprzednich przypadkach. Przyczyną takiego przebiegu, są zerowe wartości początkowe wzmocnienia K_F . Biorąc pod uwagę ten fakt jak i tą sytuację można stwierdzić, iż wyniki należy uznać za wielce satysfakcjonujące.

Przykład D

Przykład ten jest połączeniem dwóch poprzednich przypadków. Początkowe wartości współczynnika wzmocnienia filtru oraz estymaty zostały ustawione na poziomie zera (zob. rys. 6.13).

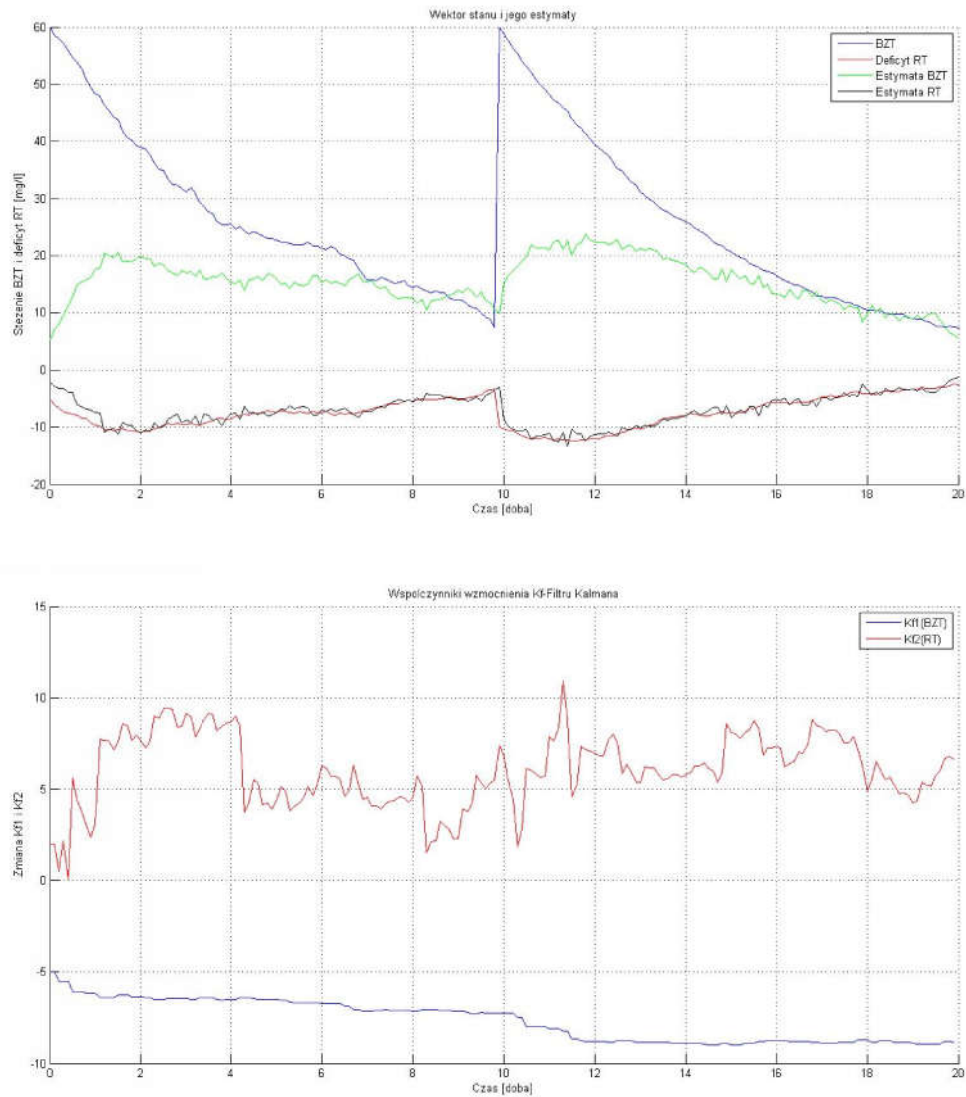


Rys. 6.13 Graficzne przedstawienie działania mechanizmu estymacji wykorzystującego horyzont obserwacji z zerowymi warunkami początkowym

Taki przypadek należy uznać, jako bardzo trudny. Jednak pomimo powolnego startu algorytm zdołał uzyskać prawidłowe wyniki estymaty. Przykład ten pokazuje możliwości tworzenia estymaty stanu w przypadku, gdy brak jest informacji o warunkach początkowych estymat i współczynnika wzmocnienia.

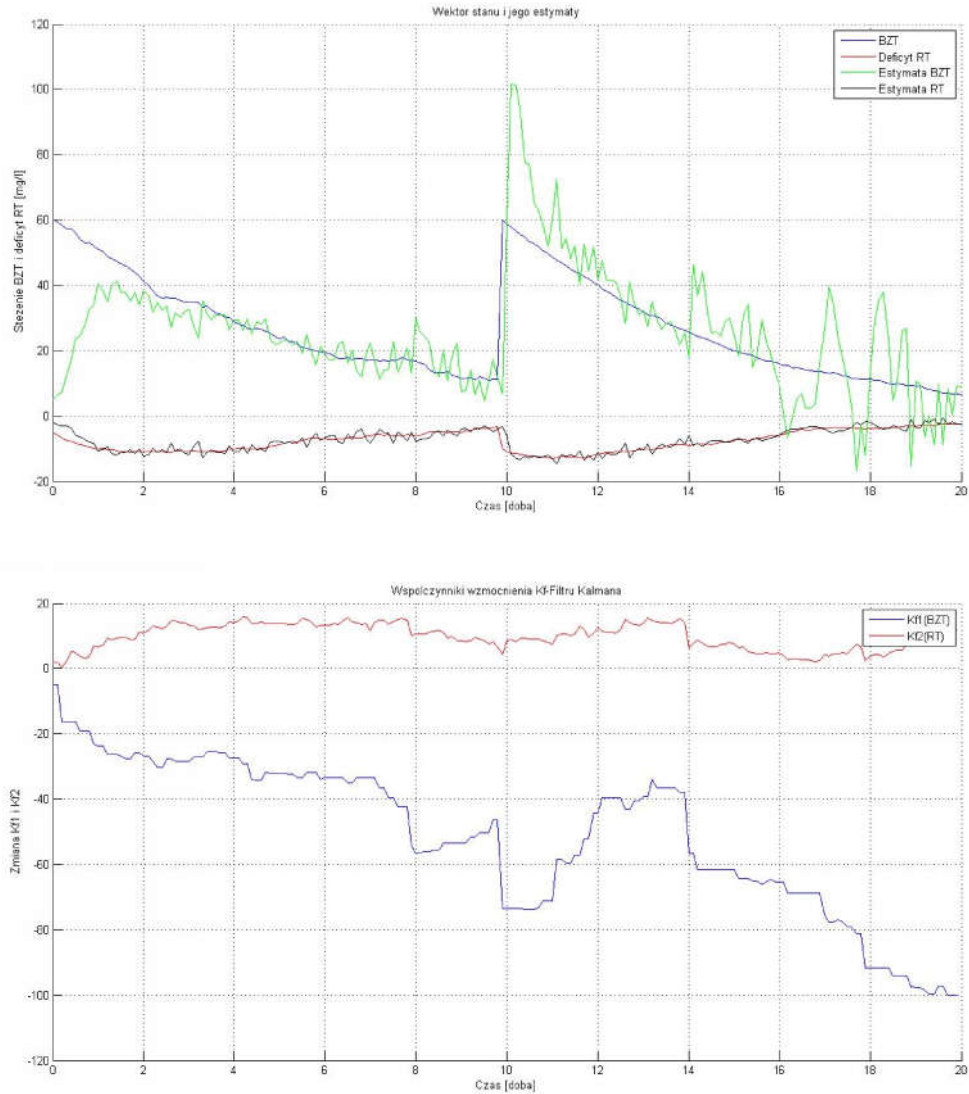
Przykład E

Następna symulacja prezentuje proces estymacji, gdy początkowa wartość „regulatora” dla wskaźnika BZT została ustawiona, jako 0.2 w jednym oraz jako 5 w drugim przypadku (zob. rys. 6.14 i 6.15).



Rys. 6.14 Estymacja wykorzystująca horyzont obserwacji ze zmniejszoną wartością wzmocnienia filtru Kalmana

Zmniejszenie wartości k_p dla wskaźnika BZT spowodowało zmniejszenie reakcji na zmiany jego estymacji. Efektem jest większa rozbieżność pomiędzy estymatą, a jej współrzędną wektora stanu.

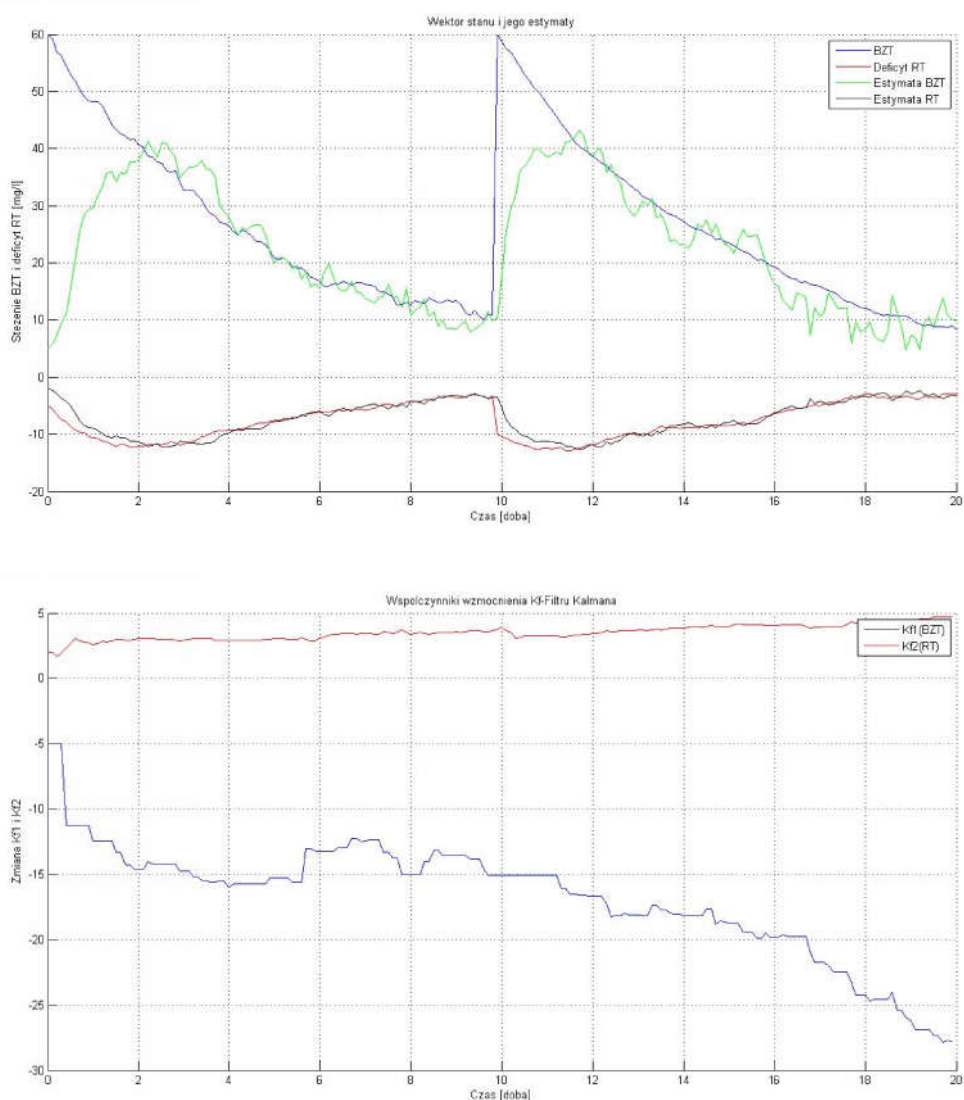


Rys. 6.15 Mechanizm estymacji wykorzystujący horyzont obserwacji ze zwiększoną wartością regulatora filtru

Zwiększenie wartości tego parametru spowodowało większe zmiany wartości K_F . Jednak przy bardzo dużych wartościach K_F wyliczonych przy zwiększonym k_p proces estymacji reaguje na najmniejsze wymuszenia generując większe jej błędy. Jest to naturalna cecha filtru estymującego.

Przykład F

Następny przykład został przeprowadzony, gdy zmniejszona została wartość współczynnika odpowiedzialnego za zmiany wzmocnienia K_F dla wskaźnika RT.



Rys. 6.16 Graficzne przedstawienie działania mechanizmu estymacji wykorzystującego horyzont obserwacji ze zmniejszoną wartością filtru

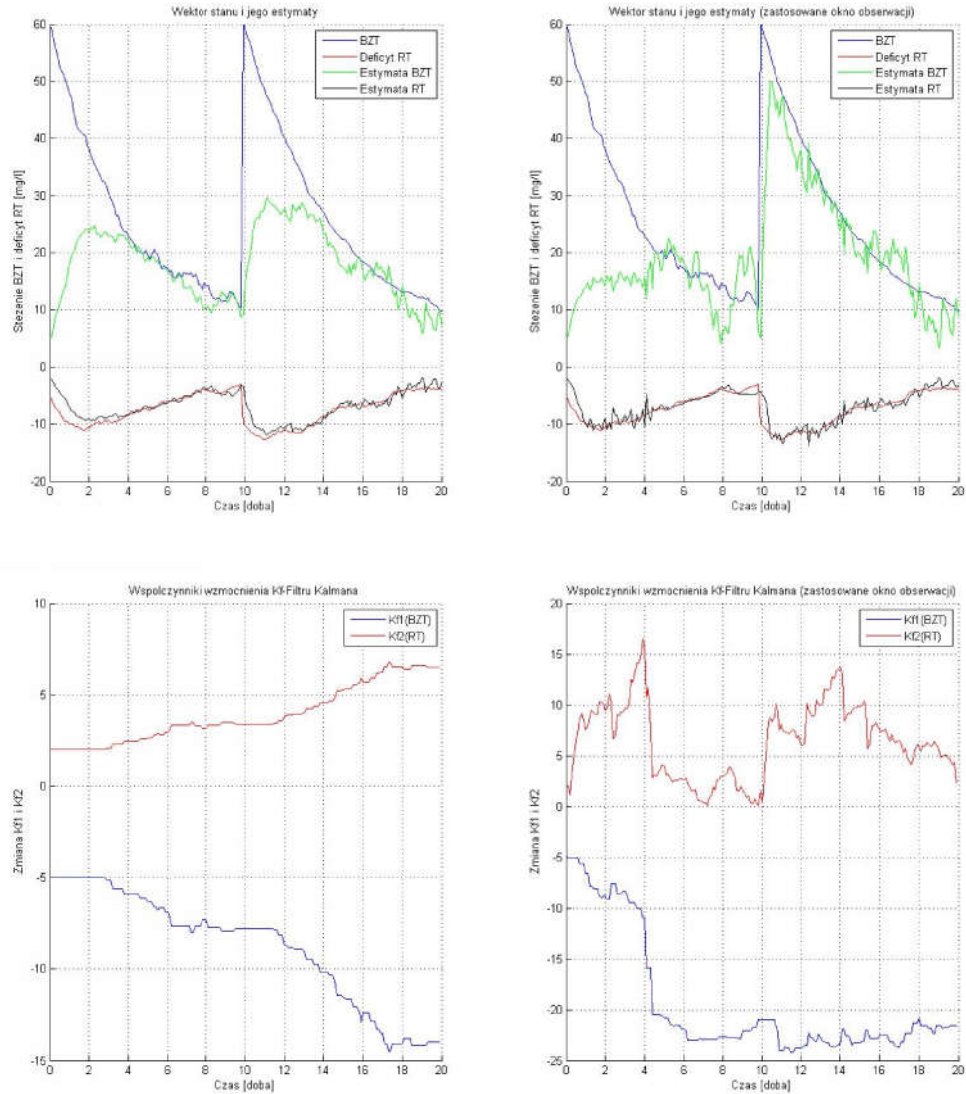
Ograniczenie to spowodowało małe zmiany wzmocnienia K_F dla RT, jednak, jakość estymacji pozostała bez zmian. Dobra, jakość estymacji, dla RT wynika z pomiarów tego wskaźnika. Estymata BZT została przeprowadzona w sposób prawidłowy z zachowaniem pozytywnej prędkości reakcji na zmianę.

6.3 Porównanie badań estymacji adaptacyjnej

Dodatkowym etapem sprawdzania mechanizmu wykorzystującego okno obserwacji jest porównanie wyników estymacji wykonanej za pomocą badanego algorytmu z wynikami otrzymanymi za pomocą programu niestosującego tego okna. Aby możliwe było porównanie tych dwóch programów (z i bez okna obserwacji) konieczne jest rozpatrywanie identycznych przypadków. W tym celu wartości wektora stanu x oraz wartości pomiarowe y zostały wykonane w oddzielnym programie oraz zapisane w pliku fizycznym, aby możliwe było korzystanie z nich w algorytmach. Zastosowanie takiego podejścia jest wymagane, ze względu na generator liczb losowych, który generuje każdą kolejną wartość, jako niepowtarzalną.

Przykład A

Pierwszy przykład porównuje obydwa algorytmy, gdy ich wartości zostały ustawione na przyjęte wartości domyślne: wektor stanu $x = [60; -5]$, estymata stanu $\hat{x} = [5; -2]$, współczynnik wzmocnienia filtru Kalmana $K_F = [-5; 2]$, „regulator” filtru Kalmana $= [2; 1]$, dolna granica błędu estymacji $\text{eps1}=[0.001]$, górna granica błędu estymacji $\text{eps2} = [1]$. W przypadku algorytmu niewykorzystującego horyzont obserwacji współczynnik ostrożności zmian został ustawiony stale na wartość $\eta = 0.3$ podczas gdy w przypadku algorytmu, który wykorzystuje horyzont obserwacji wartość współczynnika ostrożności zmian zmienia się według schematu przedstawionego na rys 6.5.

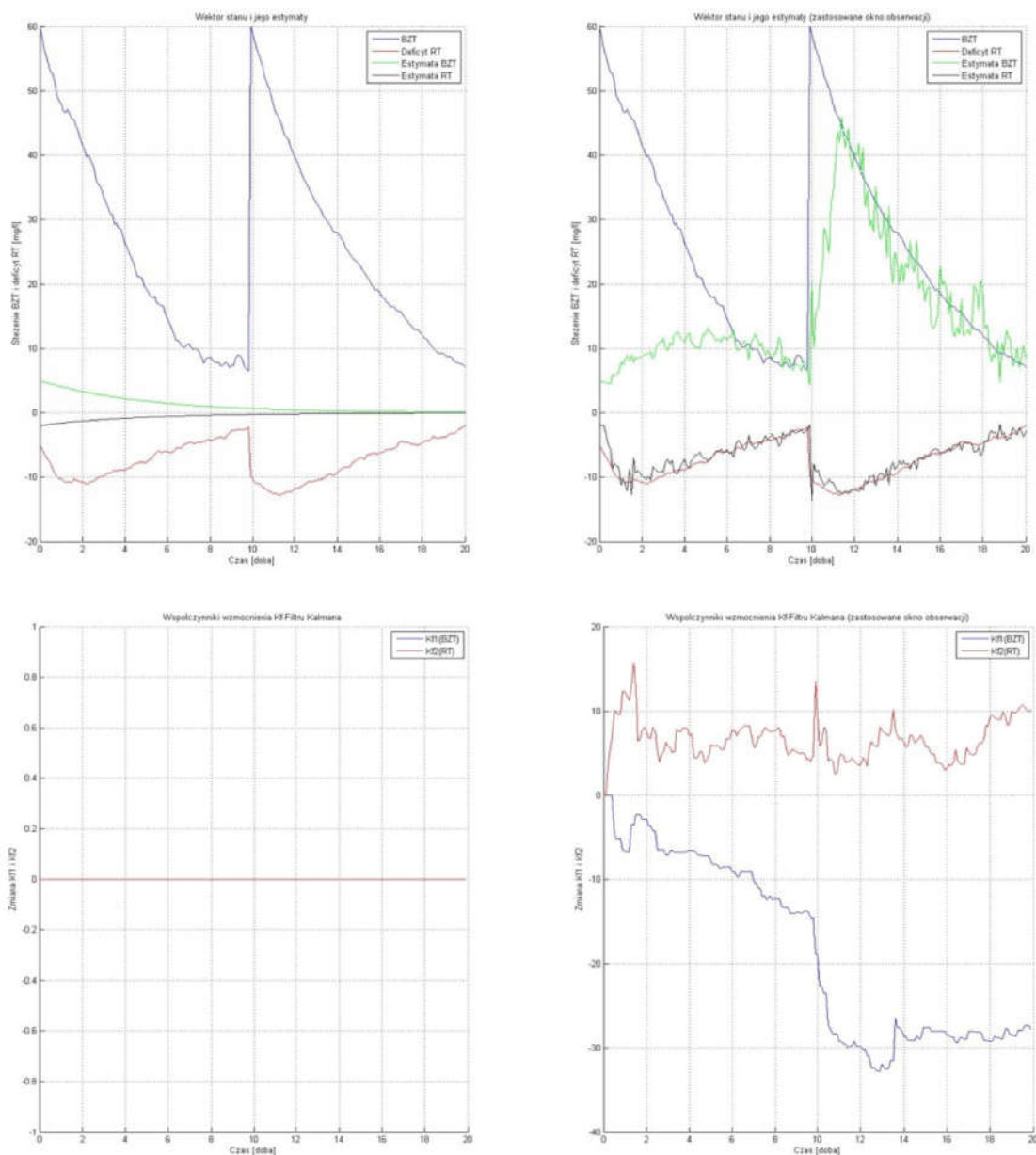


Rys. 6.17 Porównanie wyników badań symulacyjnych algorytmu bez okna obserwacji oraz algorytmu z oknem obserwacji

Wyniki badań symulacyjnych na rys.6.17 przedstawiają istotny wpływ zastosowania okna obserwacji na sposób działania algorytmu. Estymata stworzona poprzez algorytm bez okna obserwacji jest dokładna jednak podąża z pewnym opóźnieniem. Algorytm nie reaguje w sposób satysfakcjonujący na zmiany wskaźnika BZT. Natomiast estymata Wygenerowana algorytmem wykorzystującym horyzont obserwacji jest mniej dokładna jednak jest zmieniona w sposób natychmiastowy. Algorytm szybko reaguje na nagłe zmiany wskaźników. Zmiany wartości współczynników wzmocnienia filtra dokonują się bardziej dynamicznie, co wskazuje na lepsze właściwości adaptacyjne.

Przykład B

Porównana została również praca algorytmów przy zerowych wartościach początkowych współczynnika wzmocnienia filtra Kalmana.

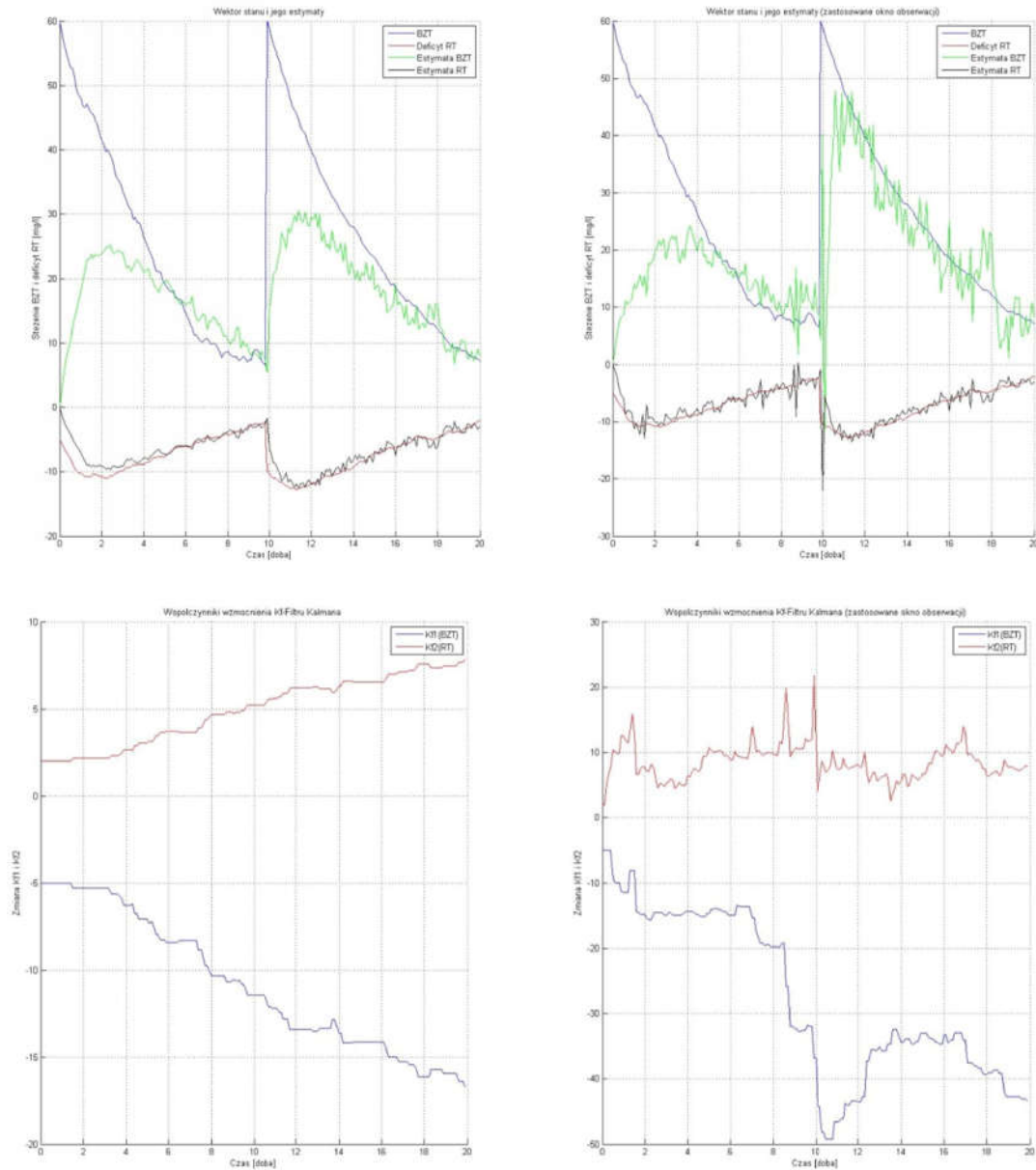


Rys. 6.18 Porównanie wyników badań symulacyjnych algorytmu bez okna obserwacji oraz algorytmu z oknem obserwacji przy zerowym początkowym współczynniku wzmocnienia filtra

Rysunek 6.18 przedstawia bezwzględną przewagę algorytmu wykorzystującego okno obserwacji w sytuacji, gdy początkowe wartości filtra Kalmana są zerowe tzn. trudne do ustalenia. Algorytm niewykorzystujący okna nie potrafi wygenerować estymaty, gdy wartość początkowa współczynnika wzmocnienia filtra jest równa zero.

Przykład C

Kolejny przykład ilustruje porównanie algorytmów przy zerowych warunkach początkowych estymaty.



Rys. 6.19 Porównanie wyników badań symulacyjnych algorytmu bez okna obserwacji oraz algorytmu z oknem obserwacji przy zerowej wartości początkowej wektora estymaty

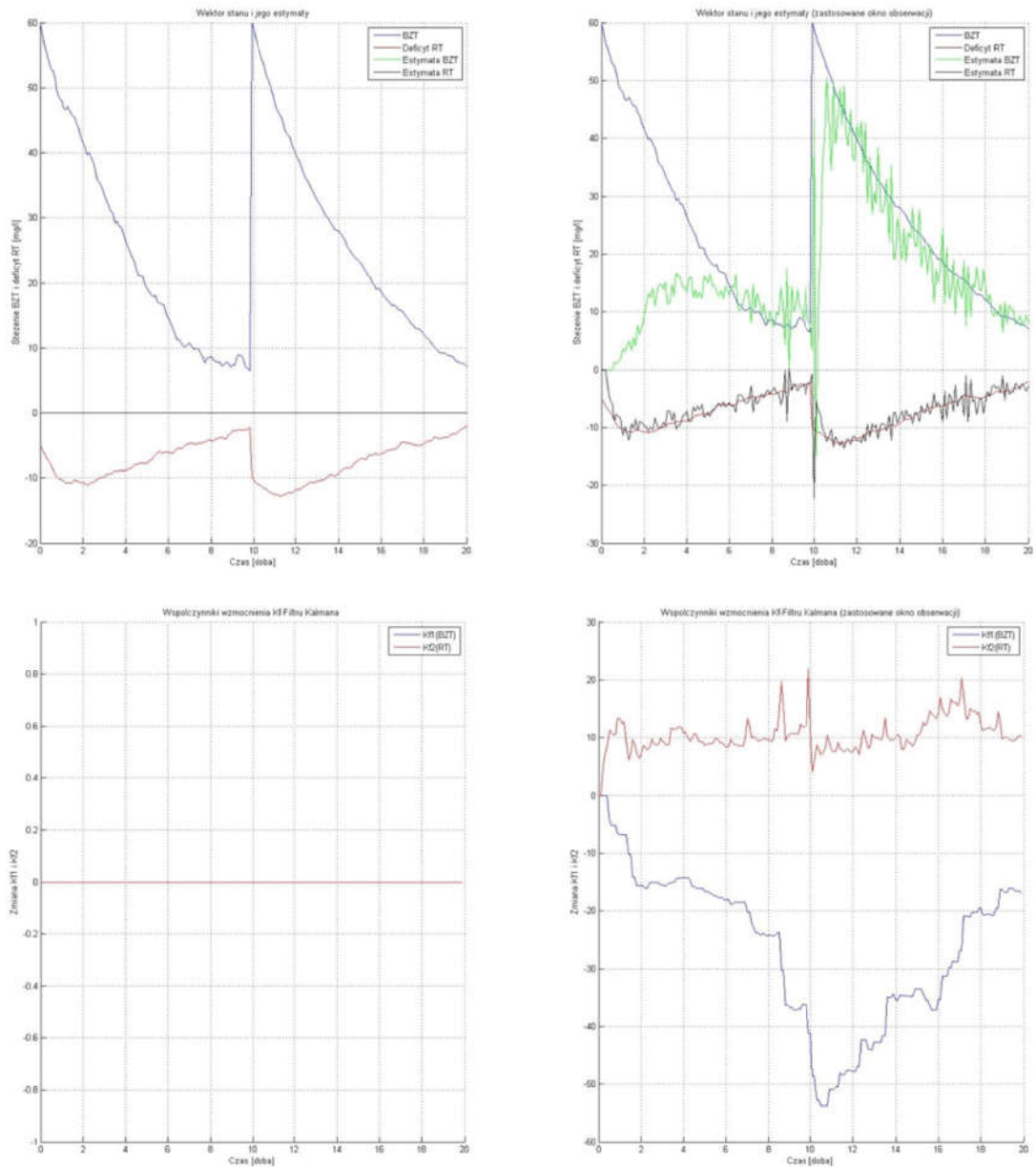
Obydwa algorytmy zdołały przeprowadzić prawidłowo proces estymacji i można stwierdzić, że:

- Estymata wykonana metodą niewykorzystującą okna została wygenerowana prawidłowo.

- Estymata wykonana metodą z oknem obserwacji również została wykonana prawidłowo, a reakcje algorytmu na dopływ boczny były szybsze.

Przykład D

Następny przykład pokazał działanie mechanizmów przy zerowych wartościach zarówno estymaty jak i współczynnika wzmocnienia filtru.



Rys. 6.20 Porównanie wyników badań symulacyjnych algorytmu bez okna obserwacji oraz algorytmu z oknem obserwacji przy warunkach początkowych równych zero

W wyniku przeprowadzonych badań można wskazać, że, przy założeniach o zerowych wartościach zarówno estymaty jak i współczynnika wzmocnienia filtru, algorytm bez okna pomiarowego nie jest w stanie wygenerować estymaty zbliżonej do wektora stanu w przeciwieństwie do algorytmu wykorzystującego horyzont obserwacji.

Obliczenia i eksperymenty symulacyjne w dysertacji przeprowadzone zostały w środowisku Matlab (ver. 7.10.0.499 R2010a), a czasy realizacji obliczeń algorytmów adaptacyjnych dla różnych wariantów danych, liczone poleceniami 'tic', 'toc' osiągały wartości około 0.11 sekundy. Natomiast przypadki dla klasycznego filtra Kalmana (rozwiązanie równań stanu, Riccatiego i filtra) osiągnęły w przybliżeniu podobne wartości. Nie mniej jednak uzyskana zależność czasowa dla filtra z adaptacyjnym doborem wzmocnienia generowała wyniki o lepszej jakości.

7. Wnioski końcowe i podsumowanie

W niniejszej pracy starano się wykazać słuszność tezy, którą sformułowano we wprowadzeniu:

Stosując zaproponowany algorytm adaptacyjny wyznaczania zmian wartości współczynnika wzmocnienia filtru można realizować estymację stanu z niemierzonymi współrzędnymi dla wybranej klasy obiektów z efektywnością porównywalną lub lepszą niż w przypadku metod klasycznych. Czas realizacji i złożoność obliczeniowa będą korzystniejsze od standardowego rozwiązania filtru Kalmana.

Rozprawa dotyczy algorytmu adaptacyjnej estymacji stanu obiektów szeregowych. Obiektem, dla którego realizowano badania był model rzeki biochemicznie zanieczyszczonej, którą interpretowano, jako zbiór reaktorów z ciągłym mieszaniem.

Model rzeki został opisany równaniami różniczkowymi cząstkowymi sprowadzonymi do równań różniczkowych zwyczajnych na charakterystykach z uwzględnieniem prędkości przepływu. Przy takim podejściu wykorzystano naturę rzeki i wówczas opis sprowadzono do licznego zbioru równań różniczkowych zwyczajnych bez straty dokładności rozważanych procesów. Zatem model reprezentowany jest zbiorem równań różniczkowych zwyczajnych.

Rozważono także realizację pomiarów ciągłych w czasie tylko jednej zmiennej wektora stanu. W naszym przypadku był to deficyt rozpuszczonego tlenu.

W warunkach rzeczywistych uzyskanie obrazu stanu, jakości wody jest zagadnieniem wymagającym ciągłej aktualizacji danych w oparciu o zmieniające się warunki zewnętrzne. Obraz ten może być podstawą do podejmowania decyzji o stanie alarmowym i generowaniu sygnałów sterujących. Na podstawie wyznaczonej estymaty można wygenerować sterowanie w postaci napowietrzania, którego reakcja „wyprzedzałaby” istnienie krytycznie dużego deficytu tlenu w wodzie.

Dla uzyskania pełnego obrazu wykonano estymacje stanu filtrem, ponieważ realizacja układu estymacji bazująca wyłącznie na pomiarach RT nie jest w stanie „zauważyć” wystąpienia dużych deficytów RT pojawiających się z opóźnieniem na skutek aktualnie dużych wartości BZT. Dla takiego układu zaproponowano także klasyczne podejście rozwiązania zagadnienia estymacji stanu filtrem Kalmana w celach porównawczych z filtrem o adaptacyjnym wyznaczaniu jego wzmocnienia.

Główne badania dotyczą zagadnień związanych z określeniem wpływu współczynnika wzmocnienia filtru na proces estymacji stanu, jakości wody w rzekach. Zagadnienie estymacji polega na określeniu wszystkich współrzędnych wektora stanu na podstawie mierzonych, nie wszystkich jego współrzędnych. Rozwiązano ten problem, modelując stan hipotetycznej rzeki równaniami różniczkowymi zwyczajnymi. Dla takiego podejścia przedstawiono zagadnienie estymacji stanu obiektu dla pomiarów ciągłych tylko jednej współrzędnej wektora stanu tj. RT. Zastosowano filtr Kalmana do rozwiązania tego zadania uzyskując dwuelementowy wektor estymaty. Ponadto zaproponowano adaptacyjny algorytm zmiany współczynnika wzmocnienia filtru.

Jako autorskie rozwiązanie zastosowano podejście adaptacyjne, którego idea adaptacji wykorzystuje równanie filtru estymującego (podobnego do równania filtru Kalmana) i w którym wartość bieżąca współczynnika wzmocnienia modyfikowana jest na podstawie różnicy pomiarów i odpowiadającym im współrzędnej wektora estymaty stanu. Ta zmiana określana jest w zależności od błędu między pomiarem, a odpowiadającą współrzędną estymaty stanu oraz jej tendencją zmian. W adaptacyjnym algorytmie modyfikowano wartości korekt tego współczynnika zależnego od wielkości i tendencji (pochodnej) zmian błędu. Można, więc stwierdzić, że:

Wprowadzenie algorytmu adaptacyjnego omija niedogodności wynikające z oszacowania charakterystyk sygnałów oddziałujących na badany obiekt oraz jego dynamika dostrajania do powstałych warunków pozwala na uzyskanie poprawnych wyników wartości współczynnika wzmocnienia filtru w procesie estymacji stanu.

W pracy zaprezentowano rezultaty badań symulacyjnych adaptacyjnego algorytmu doboru współczynnika wzmocnienia filtru, gdzie rozważono model matematyczny opisany równaniami różniczkowymi. W przeprowadzonych badaniach symulacyjnych uzyskano poprawne wyniki estymacji otrzymanych za pomocą adaptacyjnego algorytmu doboru współczynnika wzmocnienia filtru.

W pracy również uwzględniano wykorzystanie kilku pomiarów w każdym etapie obliczeń współczynnika wzmocnienia, K_F , które nazywano oknem pomiarowym, służące do aktualizacji współczynnika wzmocnienia. W wyniku badań okazało się, iż wykorzystanie informacji o błędzie estymacji z chwil wcześniejszych nazywane oknem obserwacji ma istotny wpływ na działanie algorytmu estymacji. Adaptacyjny algorytm wykorzystujący okno obserwacji tworzy estymatę stanu w sposób prawidłowy, a w porównaniu z algorytmem niewykorzystującym historii błędu reaguje szybciej na

zmiany wektora stanu. Wykorzystanie okna obserwacji daje możliwość prawidłowego tworzenia estymaty w przypadku, gdy nie są znane wartości początkowe zarówno estymaty jak i współczynnika wzmocnienia filtru. Algorytm charakteryzuje się uniwersalnością w dostrajaniu do odpowiednich warunków funkcjonowania poprzez odpowiednie zmiany parametrów określonych przez eksperymentującego, co może powodować uzyskanie dużej wrażliwości na poszczególne współrzędne wektora estymaty stanu. Zastosowanie okna obserwacji sprawiło, że wartości współczynnika wzmocnienia filtru dostosowują się, czym potwierdzają adaptacyjność mechanizmu i jego możliwości zmian do panujących warunków.

Okno obserwacji bazuje na określonej liczbie chwil czasowych w badanym algorytmie. Istnieje możliwość, aby kolejne wersje algorytmu uwzględniały większe okno czasowe. Zastosowanie większej ilości pomiarów na każdym etapie obliczeń K_F wpływa pozytywnie na otrzymywane wyniki badań.

Opracowanie adaptacyjnego algorytmu wyznaczającego, estymatę wektora stanu, w przypadku braku pełnej informacji o wektorze przysporzyły wiele trudności. Jednak zaprojektowano i zaprogramowano adaptacyjny algorytm, jako autorskie rozwiązanie. W szczególności algorytm ukierunkowany jest na strukturę szeregową obiektów opisanych równaniami różniczkowymi zwyczajnymi. Zaproponowany algorytm estymacji stanu obiektu generuje wartości współczynnika wzmocnienia w równaniu filtru o strukturze jak filtr Kalmana, posiadając cechy uniwersalności zastosowania w obiektach danej klasy.

Otrzymane rezultaty badań upoważniają do stwierdzenia, że cel pracy został osiągnięty gdyż zaproponowany adaptacyjny algorytm generuje poprawne wartości estymat. Dalsze badania mogą dotyczyć zagadnień związanych z ilością pomiarów i urządzeń sterujących, a także projektowaniem układu monitorującego stan, jakości wody.

Przedstawione w rozprawie zagadnienia stanowią doskonały fundament do rozwijania tematyki modelowania matematycznego stanu rzek, w którym do uzyskania pełnego obrazu obiektu stosuje się adaptacyjny algorytm estymacji stanu ze względu na wymuszenia zakłócające, które wynikają głównie ze zmian pogody. Można też śmiało stwierdzić, iż projektowany w przyszłości system monitorująco-sterujący, jakością wody, przyczyni się do ochrony środowiska naturalnego i podniesie bezpieczeństwo ekologiczne.

8. Bibliografia

- [1] Amy G. L., Tan L., Davis M. K., *The effects of ozonation and activated carbon adsorption on trihalomethane speciation*. Wat. Res., 1991/92, s.191.
- [2] Anderson B, Moore J. *Filtracja optymalna*. WNT, Warszawa 1984.
- [3] Anielak A. *Chemiczne i fizykochemiczne oczyszczanie ścieków*. PWN Warszawa 2002.
- [4] Banachowski L., Diks K., Rytter W. *Algorytmy i struktury danych*. WNT, wyd. v, 2006.
- [5] Banachowski L., Kreczmar A., Rytter W. *Analiza algorytmów i struktur danych*. WNT, Warszawa 1989.
- [6] Bjorck A., Dahlquist G. *Metody numeryczne*. PWN, Warszawa 1987.
- [7] Casulli V., Walters R. A., *An unstructured grid, three-dimensional model based on the shallow water equations*. International Journal for Numerical Methods in Fluids Vol. 32, pp. 331-348, 2000.
- [8] Ciesielski M., Leszczyński J. *Schemat MRS dla równania anormalnej dyfuzji z pochodną niecałkowitego rzędu po czasie*. Scientific Research of the Institute of Mathematics and Computer Science 2002 nr 1(1), s. 39–46.
- [9] Cormen T.H., Leiserson Ch.E., Rivest R.L. *Wprowadzenie do algorytmów*. WNT, Warszawa 2001.
- [10] Cormen T.H., Leiserson Ch.E., Rivest R.L., Stein C. *Wprowadzenie do algorytmów*.(nowe wydanie), WNT, Wyd. v, 2004.
- [11] Dasgupta S., Papadimitriou Ch., Vazirani U. *Algorytmy*. PWN Warszawa 2010.
- [12] Dobbins W. E. *BOD and oxygen relationships in streams*. J. San. Div., Proc. ASCE, 90, s. 53, 1964.
- [13] Dojlido J., Zerbe J. *Instrumentalne metody badania wody i ścieków*. Arkady, Warszawa 1997.
- [14] Donald E. Knuth. *Sztuka programowania*. WNT, 2002-2008.
- [15] Drozdek A. *C++ algorytmy i struktury danych*. Helion, Gliwice 2004.
- [16] Dryja M., Jankowscy J. i M. *Przegląd metod i algorytmów numerycznych*. WNT, Warszawa 1988.
- [17] Dudek-Dyduch E., Wąs J., Dutkiewicz L., Grobler-Dębska K., Gudowski B. *Metody numeryczne – wybrane zagadnienia*. AGH, Kraków 2011.

- [18] Floreczyk H., Głowiński S. *Samooczyszczanie się rzek Polski w świetle dotychczasowych badań*. Ochrona Środowiska nr 3, s. 11-17, 1981.
- [19] Fortuna Z., Macukow B., Wąsowski J. *Metody numeryczne*. WNT, Warszawa 1993.
- [20] Fox D., *Adapting the sample size in particle filters through KLD-sampling*. The International Journal of Robotics Methods Research Vol. 22, pp.985-1003, 2003.
- [21] Gourishankar V., Lawal M A. *A digital water quality controller for polluted streams*. Int. J. Systems Sci. Vol. 9, s. 889, 1978.
- [22] Harel D. *Rzecz o istocie informatyki algorytmika*. WNT, Warszawa 2001.
- [23] Hilfer R. *Fractional diffusion based on riemann-liouville fractional derivatives*. J. Phys. Chem. B 2000 nr 104, s. 3914–3917.
- [24] http://www.traxelektronik.pl/img/stacja_hydrometeo.gif
- [25] James A. (red.). *Modelowanie matematyczne w oczyszczaniu ścieków i ochronie wód*. Arkady, Warszawa 1986.
- [26] Jurczyk A. *Wizualizacja rozkładu zmiennej z wykorzystaniem pakietu Matlab 6.5*. [online].[dostęp:2014-02-21].
http://www.kmp.wm.tu.koszalin.pl/cms/dydaktyka/atomkowska/atomkowska_12.pdf.
- [27] Kacprzyk J., Hryniewicz O., Kulczycki P. *Techniki informacyjne w badaniach systemowych*. WNT, Warszawa 2007.
- [28] Kaczorek T. *Teoria układów regulacji automatycznej*. WNT, Warszawa 1977.
- [29] Kaczorek T., Dzieliński A., Dąbrowski W., Łopatka R. *Podstawy teorii sterowania*. WNT, Warszawa 2009.
- [30] Kasprzak W., *Adaptive computation methods in digital image sequence analysis*. Warsaw University of Technology, Warszawa, No. 127, 2000.
- [31] Klamka J., Ogonowski Z. *Metody numeryczne*. PŚ, Gliwice 2013.
- [32] Kowal A., Świdorska-Bróz M. *Oczyszczanie wody. podstawy teoretyczne i technologiczne, procesy i urządzenia*. PWN, Warszawa 2009.
- [33] Kowal A., Świdorska-Bróz M., *Oczyszczanie wody. podstawy teoretyczne i technologiczne, procesy i urządzenia*. PWN, Warszawa 2007.
- [34] Kreyszig E. *Advanced Engineering Mathematics*. Wiley&Sons and Inc., 1993.
- [35] Krutys P., Kwater T. *Symulacja modelu matematycznego rzeki opisanego równaniami różniczkowymi cząstkowymi*. Technical News 2007, s.142-143.
- [36] Kwater T. *Estymacja i sterowanie pewnymi obiektami o strukturze kaskadowej na przykładzie systemu aeratorów mechanicznych – rozprawa doktorska*. Politechnika Rzeszowska, Rzeszów 1986.

- [37] Kwater T., Gomółka Z., Krutys P. Adaptacyjny podejście do wyznaczania wzmocnienia filtru Kalmana. *Technical News*, 2010/1(31), 2(32) s.170-172.
- [38] Kwater T., Kędzior Z., Pękała R. *The Matematical model of long river and neural network in estimation process*. Proceedings IMACS Symposium on Mathematical Modelling, late contribution volume, Technical University in Vienna, Austria, February 5-7,1997, p. 13-18.
- [39] Kwater T., Krutys P. *Estimation of pollution of the river by artificial neural networks*. Symbiosis of Engineering and Computer Science, Wyd. Uniwersytetu Rzeszowskiego, Rzeszów 2010, ISBN 978-83-7338-620-4, str.37-66.
- [40] Kwater T., Krutys P., Bartman J., Pękała R. *Simulation of diffusion experiments in environment water polluted, 8-th aims international conference on dynamical systems, differential equations and applications*. Dresden University of Technology, Department of Mathematics, p. 307
- [41] Kwater T., Krutys P., Kwiatkowski B., Żesławska E. *Symulacje komputerowe modelu matematycznego zanieczyszczonej biochemicznie wody z uwzględnieniem zjawiska dyfuzji*. „Education Technology Computer Science”, Scientific annual. 2013 nr 4, s. 345-350.
- [42] Kwater T., Krutys P., Twaróg B., Bartman J. *Interpolacyjne metody rozwiązania równań różniczkowych cząstkowych na podstawie zbioru równań różniczkowych zwyczajnych*. *Technical News* 2013, s.73-75.
- [43] Kwater T., Pękała R., Krutys P. *The mathematical models of water pollution and interpretation of their distribution*. *Technical News* 2009, s.95-97.
- [44] Kwater T., Twaróg B., Krutys P. *Estymacja stanu filtrem z adaptacyjnym mechanizmem doboru współczynników wzmocnienia*. *Przegląd Elektrotechniczny* R. 89 NR 12/2013, pp.29-32.
- [45] Laks Ireneusz., *Selected problems of numerical modeling of long section of lowland rivers*. Poznań 2005.
- [46] Mańczak H. *Techniczne podstawy ochrony wód przed zanieczyszczeniem*. Politechnika Wrocławska, Wrocław 1972.
- [47] Matejczuk W., Grabowski P. *Ciągły pomiar BZT jako ważny czynnik ekonomiczny w oczyszczalniach ścieków i zakładach przemysłowych*. *Gaz, Woda, Techn. Sanit.* 7/1995, s. 223.
- [48] Milewski S. *Metody numeryczne – konspekt*. PK.”http://www.15.pk.edu.pl/~slawek/WWW/SMilewski_Num_Met1.pdf”.

- [49] Miltner R., Baker D. B., Spath T. F. Frank C. A. *Treatment of seasonal pesticides in surface waters*. JAWWA, 1989/1 s. 43.
- [50] Mrozek B., Mrozek Z., *Matlab i Simulink: Poradnik użytkownika*. Helion, Gliwice 2010.
- [51] Nadrian C. Seeman. *"Na granicy życia i nanotechnologii"*. Świat Nauki, lipiec 2004
- [52] Neil Gershenfeld i Isaac I. Chuang. *"Molekularne komputery kwantowe"*. Świat Nauki, sierpień 1998.
- [53] Olańczuk-Neyman K. *Laboratorium z biologii środowiska*. Politechnika Gdańska, Gdańsk 1998.
- [54] Ostalczyk P., *Zarys rachunku różniczkowo-całkowego ułamkowych rzędów: teoria i zastosowania w automatyce*. Wyd. Politechniki Łódzkiej, Łódź 2008.
- [55] Ozga - Zielińska M. *Metody opisu i analizy systemów hydrologicznych*. Politechnika Warszawska, Warszawa 1976.
- [56] Palczewski A. *Równania różniczkowe zwyczajne. teoria i metody numeryczne z wykorzystaniem komputerowego systemu obliczeń symbolicznych*. WNT, Warszawa 1999.
- [57] Podgórski J., *Metoda różnic skończonych*. [online].[dostęp: 2014-02-21]. dostępny w internecie: <http://akropolis.pol.lublin.pl/users/jpkmb/mrs.pdf>.
- [58] Podlubny I., *Fractional differential equations*. Academic Press, San Diego 1999.
- [59] Povstenko J., *Wprowadzenie do metod numerycznych*. Warszawa, Exit 2002.
- [60] Shiklomanov I. A., *World water resources. a new appraisal and assessment for the 21 century*. United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization, Paris 1998.
- [61] Singh M. G., *Dynamical hierarchical control*. North-Holland, Amsterdam 1977.
- [62] Świdarska-Bróz M. *Mikrozanieczyszczenia w środowisku wodnym*. Politechnika Wrocławska, Wrocław 1993.
- [63] Szymkiewicz R., *Modelowanie matematyczne przepływów w rzekach i kanałach*. PWN, Warszawa 2000.
- [64] Tlenomierz CO-401, Firmy Elmetron Sp.j ul. W. Witosa 10 41-814 Zabrze.
- [65] Wilhelms A. Z. *Simultaneous Determination of Dissolved Organic Carbon and Inorganic Carbon Compounds*. Wasser Abwasser Forsch. 2/1982, s. 15.
- [66] Zalewski A., Cegła R., *Matlab – obliczenia numeryczne i ich zastosowanie*. NAKOM, Poznań 1996.