

EVALUACION DEL DESEMPEÑO DEL FILTRO DE KALMAN UNSCENTED EN PROCESOS DE POLIMERIZACION.

R. Galdeano, M. Asteasuain y M.C. Sánchez^a

*^aPlanta Piloto de Ingeniería Química, PLAPIQUI (UNS-CONICET)
Universidad Nacional del Sur
Camino La Carrindanga km 7, Bahía Blanca, Buenos Aires
msanchez@plapiqui.edu.ar*

1 - Resumen

La calidad de la información de una planta química afecta significativamente los resultados de las actividades de optimización y control, los cuales inciden notoriamente sobre las especificaciones del producto y los costos de la producción.

A fin de mejorar el desempeño global de los procesos se han comenzado a implementar lazos cerrados de Optimización Dinámica en Tiempo Real (DRTO). Estos comprenden las actividades de Reconciliación Dinámica, Optimización Dinámica y Control. La técnica clásica utilizada para estimación de estados en lazos de DRTO es el filtro de Kalman Extendido. Sin embargo, esta técnica puede presentar inconvenientes, particularmente para sistemas que se alejan de la linealidad (Tudoroiu y Khorasani, 2005).

En los últimos años se ha desarrollado e implementado la técnica denominada filtro de Kalman “Unscented” (UKF). Su aplicación no requiere linealizar el modelo del proceso, por lo cual resulta más preciso para estimar los estados de modelos no lineales (Romanenko y Castro, 2004).

En este trabajo se propone analizar el desempeño del UKF para su aplicación en lazos de DRTO en procesos de polimerización. Estos procesos se caracterizan por su alta no linealidad, así como por la dificultad de contar con mediciones en línea confiables. Por lo tanto, resulta de gran importancia contar con métodos de estimación de estados apropiados para estos procesos.

2 - Marco Teórico

El filtro de Kalman extendido (EKF) ha sido la técnica estándar usada en un gran número de aplicaciones para la estimación de estados y de parámetros en sistemas dinámicos no lineales. Sin embargo cuando se aplica a sistemas complejos aparecen problemas de tipo numérico y de implementación (Wan y van der Merwe, 2001). En el EKF, se aproxima la distribución de probabilidad real del estado en cada instante por una distribución gaussiana. El primer momento de la distribución se propaga a través del modelo no lineal, mientras que el segundo momento se propaga a través de la versión linealizada del modelo. Cuando este es altamente no lineal, dichas aproximaciones pueden generar esperanzas y covarianzas muy distintas de las reales, conduciendo en el peor de los casos a la divergencia del filtro. Otro inconveniente del EKF es el requerimiento del cálculo del jacobiano de la matriz de transición de estados del proceso, lo cual origina costos computacionales altos y errores propios de la linealización.

El filtro de Kalman Unscented (UKF) es un método desarrollado recientemente para procesos no lineales que evitan los problemas planteados para el EKF.

3 - Objetivos

El objetivo de este trabajo es implementar una herramienta de estimación de estados basada en filtrado que se aplique especialmente a procesos no lineales tales como los procesos de polimerización, y compararla con otros estimadores clásicos mediante el análisis de indicadores de desempeño, con énfasis en su aplicación para lazos DRTO.

4 - Metodología

4.1 - La transformación “Unscented”

La transformación “unscented” (UT) se utiliza para calcular los primeros momentos de la función de densidad de probabilidad de una variable aleatoria $\mathbf{z} = f(\mathbf{x})$, que resulta de aplicar una transformación no lineal f a una variable aleatoria \mathbf{x} de estadística conocida (Julier y Uhlmann, 1997; Wan y Van der Merwe, 2001).

Se considera una variable aleatoria \mathbf{x} de dimensión L , con media $\bar{\mathbf{x}}$ y covarianza \mathbf{P}_x , que se propaga a través de una función no lineal $\mathbf{z} = f(\mathbf{x})$. Para calcular la estadística de \mathbf{z} , se forma la matriz $\boldsymbol{\chi}$ que comprende los siguientes $(2L+1)$ vectores columna $\boldsymbol{\chi}_i$:

$$\boldsymbol{\chi}_0 = \bar{\mathbf{x}} \quad (1)$$

$$\boldsymbol{\chi}_i = \bar{\mathbf{x}} + \left(\sqrt{(L+\lambda)\mathbf{P}_x} \right)_i, \quad i = 1, \dots, L \quad (2)$$

$$\boldsymbol{\chi}_i = \bar{\mathbf{x}} - \left(\sqrt{(L+\lambda)\mathbf{P}_x} \right)_{i-L}, \quad i = L+1, \dots, 2L \quad (3)$$

$$\lambda = \alpha^2(L + \kappa) - L \quad (4)$$

donde λ es un parámetro de escalado.

Los vectores $\boldsymbol{\chi}_i$ se propagan a través de la función no lineal $\boldsymbol{\gamma}$

$$\boldsymbol{\gamma} = f(\boldsymbol{\chi}_i), \quad i = 1, \dots, 2L \quad (5)$$

La esperanza y la covarianza de \mathbf{z} se aproximan por las siguientes sumas ponderadas:

$$\bar{\mathbf{z}} \approx \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(m)} \boldsymbol{\gamma}_i, \quad (6)$$

$$\mathbf{P}_z \approx \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(c)} (\boldsymbol{\gamma}_i - \bar{\mathbf{z}})(\boldsymbol{\gamma}_i - \bar{\mathbf{z}})^T, \quad (7)$$

$$W_0^{(m)} = \frac{\lambda}{L + \lambda}, \quad (8)$$

$$W_0^{(c)} = \frac{\lambda}{L + \lambda} + 1 - \alpha^2 + \beta, \quad (9)$$

$$W_i^{(m)} = W_i^{(c)} = \frac{\lambda}{2(L + \lambda)}, \quad i = 1, \dots, 2L \quad (10)$$

La constante α determina la dispersión de los puntos sigma alrededor de $\bar{\mathbf{x}}$, κ es un parámetro de escala secundario y β se usa para incorporar conocimiento a priori de la

distribución de \mathbf{x} . Habitualmente α se elige dentro del intervalo ($1 \times 10^{-4} \leq \alpha \leq 1$), κ se toma igual a 0 ó $(3-L)$ (Julier y Uhlmann, 2004) y $\beta = 2$ resulta óptimo para distribuciones gaussianas.

Este método genera estimaciones de $\bar{\mathbf{z}}$ y \mathbf{P}_z correctas hasta el tercer orden de la esperanza y covarianza del desarrollo multivariable de Taylor de la función f en torno a $\bar{\mathbf{x}}$, cuando la distribución de \mathbf{x} es simétrica. Para distribuciones no simétricas, produce estimaciones correctas hasta el segundo orden, dependiendo de la exactitud de los momentos de tercer orden y de la elección de los parámetros α y β (Wan y van der Merwe, 2001).

Si bien el método es similar al de muestreo de Monte Carlo, la diferencia fundamental es que las muestras no son tomadas al azar, sino de acuerdo a un algoritmo determinístico, que permite capturar la información de alto orden de la distribución de probabilidad tomando sólo un número pequeño de puntos.

En la Fig. 1a se representa la propagación de la media y la covarianza para un sistema de dos dimensiones obtenido usando Monte Carlo. Las Figs. 1b y 1c representan los resultados empleando la aproximación lineal y la UT respectivamente. La superioridad que evidencia la UT en la calidad de la estimación y su implementación sencilla la han transformado en una alternativa a la linealización para aplicaciones de filtros no lineales (Romanenko y Castro, 2004).

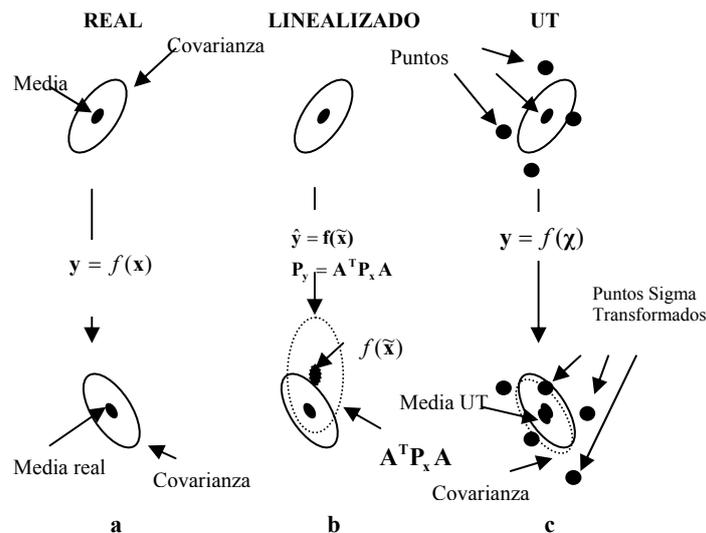


FIGURA 1: Ejemplo de propagación de la varianza y la media

4.2 - Filtro Kalman "Unscented"

El UKF surge al incorporar la UT al EKF a fin de mejorar las aproximaciones de los dos primeros momentos de una variable aleatoria que resulta de propagar otra variable aleatoria (supuesta gaussiana) a través de una transformación no lineal, donde el modelo es de la forma:

$$\mathbf{x}_k = F(\mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{v}_{k-1}) \quad (11)$$

$$\mathbf{y}_k = H(\mathbf{x}_k, \mathbf{n}_k) \quad (12)$$

siendo \mathbf{x}_k , \mathbf{u}_k , \mathbf{v}_k , \mathbf{y}_k y \mathbf{n}_k los vectores de estados, de variables manipuladas, del ruido del proceso, de las medidas y del ruido de las medidas, respectivamente, en el instante k . Se asumen las siguientes distribuciones de probabilidad: $p(\mathbf{x}_{k-1} | \mathbf{y}_{1:k-1}) \sim N(\bar{\mathbf{x}}_{k-1} | \mathbf{P}_{k-1 | k-1})$,

$p(\mathbf{v}_{k-1})=N(0,\mathbf{Q})$, $p(\mathbf{n}_k)=N(0,\mathbf{R})$, $p(\mathbf{x}_{k-1}|\mathbf{y}_{1:k-1})=N(\mathbf{x}_{k|k-1},\mathbf{P}_{k|k-1})$, $p(\mathbf{x}_k|\mathbf{y}_{1:k})=N(\mathbf{x}_{k|k},\mathbf{P}_{k|k})$. El cálculo de los estados y su matriz de covarianza implica propagar puntos sigma a través del modelo de la siguiente manera:

Inicialización: Se definen e inicializan el vector de estados aumentado ($L \times 1$) que incluye a \mathbf{v}_{k-1} y \mathbf{n}_k y la matriz de covarianza aumentada

$$\hat{\mathbf{x}}_{k-1}^a = [\mathbf{x}_k \ \mathbf{v}_k \ \mathbf{n}_k]^T \quad (13)$$

$$\mathbf{P}_{k-1}^a = \begin{bmatrix} \mathbf{P}_{k-1|k-1} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{Q} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{R} \end{bmatrix} \quad (14)$$

Calculo de los puntos sigma: Se genera la matriz de puntos sigma para $\hat{\mathbf{x}}_{k-1}^a$

$$\boldsymbol{\chi}_{k-1}^a = \left[\hat{\mathbf{x}}_{k-1}^a \quad \hat{\mathbf{x}}_{k-1}^a + \sqrt{(L + \lambda)\mathbf{P}_{k-1}^a} \quad \hat{\mathbf{x}}_{k-1}^a - \sqrt{(L + \lambda)\mathbf{P}_{k-1}^a} \right] \quad (15)$$

Actualización en el tiempo: Se propagan estos puntos sigma a través de F

$$\boldsymbol{\chi}_{k/k-1}^a = F[\boldsymbol{\chi}_{k-1}^a, \mathbf{u}(k)] \quad (16)$$

y utilizando sumas ponderadas se calculan los valores predichos para $\hat{\mathbf{x}}_k^-$ y \mathbf{P}_k^-

$$\hat{\mathbf{x}}_k^- = \sum_{i=0}^{2L} W_i^m \boldsymbol{\chi}_{i,k/k-1} \quad (17)$$

$$\mathbf{P}_k^- = \sum_{i=0}^{2L} W_i^c [\boldsymbol{\chi}_{i,k/k-1} - \hat{\mathbf{x}}_k^-][\boldsymbol{\chi}_{i,k/k-1} - \hat{\mathbf{x}}_k^-]^T \quad (18)$$

Del mismo modo se determina el vector de innovaciones del proceso

$$\mathbf{I}_{k/k-1} = H[\boldsymbol{\chi}_{k/k-1}, \mathbf{u}(k)] \quad (19)$$

$$\hat{\mathbf{y}}_k^- = \sum_{i=0}^{2L} W_i^m \mathbf{I}_{i,k/k-1} \quad (20)$$

Actualización con mediciones: la covarianza de las mediciones se calcula como

$$\mathbf{P}_{y_k, y_k} = \sum_{i=0}^{2L} W_i^c [\mathbf{I}_{i,k/k-1} - \hat{\mathbf{y}}_k^-][\mathbf{I}_{i,k/k-1} - \hat{\mathbf{y}}_k^-]^T \quad (21)$$

y la correlación cruzada entre los estados estimados y la secuencia de mediciones es

$$\mathbf{P}_{x_k, y_k} = \sum_{i=0}^{2L} W_i^c [\boldsymbol{\chi}_{i,k/k-1} - \hat{\mathbf{x}}_k^-][\mathbf{I}_{i,k/k-1} - \hat{\mathbf{y}}_k^-]^T \quad (22)$$

Con esta información es posible evaluar la ganancia de Kalman y actualizar $\hat{\mathbf{x}}_k$ y \mathbf{P}_{k-1}

$$\mathbf{K} = \mathbf{P}_{x_k, y_k} \mathbf{P}_{y_k, y_k}^{-1} \quad (23)$$

$$\hat{\mathbf{x}}_k = \hat{\mathbf{x}}_k^- + \mathbf{K}(\mathbf{y}_k - \hat{\mathbf{y}}_k^-) \quad (24)$$

$$\mathbf{P}_k = \mathbf{P}_k^- - \mathbf{K} \mathbf{P}_{y_k, y_k} \mathbf{K}^T \quad (25)$$

5 – Resultados

La Fig. 2 representa el proceso de polimerización por radicales libres utilizado para evaluar el desempeño del UKF.

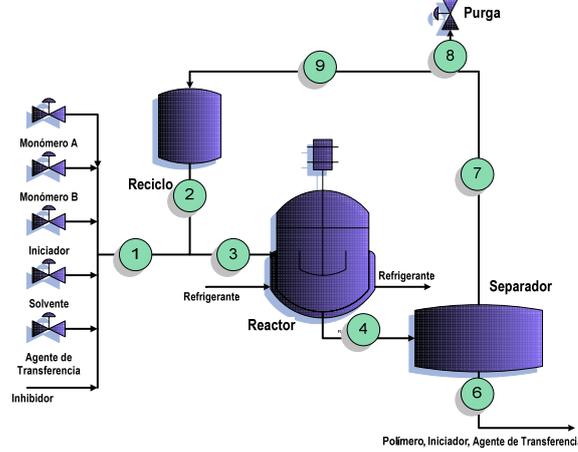


FIGURA 2: Esquema del Proceso de Copolimerización

El monómero A (Metacrilato de Metilo) y el monómero B (Acetato de Vinilo) se alimentan continuamente al reactor, junto con el iniciador (Azobisisobutilonitrilo), solvente (Benceno), agente de transferencia (Acetaldehido) y eventualmente inhibidor. Estas corrientes (1) se combinan con el reciclado (2) e ingresan al reactor encamisado, el cual se asume que es de mezcla perfecta. Una corriente fría ingresa a la camisa para remover el calor de polimerización. El polímero, solvente, monómeros sin reaccionar, iniciador y agente de transferencia salen del reactor e ingresan al separador (4) donde se separa el polímero (6). Se considera, además, que junto con el polímero se separan también el iniciador y el agente de transferencia (Congalidis y col., 1989). Los monómeros sin reaccionar y el solvente se reciclan. Una corriente de purga (8) se emplea para evitar la acumulación de inertes. Después de la purga (9), los monómeros y el solvente se almacenan en un tanque para controlar el flujo de reciclado (2) el cual se agrega a la corriente fresca (1) para nuevamente ingresar al reactor.

La formulación del modelo no lineal para el reactor de polimerización es la siguiente:

Balance de Masa, Momentos y Energía:

$$\frac{d\Gamma_k}{dt} = \frac{\Gamma_{kf} - \Gamma_k}{\theta_r} + R_k \quad \Gamma_k(0) = \Gamma_{k0} \quad \Gamma = C_k (k = a, b, i, s, t, z), \lambda_a (a = 0, 1, 2), \psi_a (a = 0, 1, 2) \quad (26)$$

donde C_k es la concentración de la especie k , λ_a es el momento de orden a de la distribución de pesos moleculares de los radicales, ψ_a es el momento de orden a de la distribución de pesos moleculares del copolímero y θ_r es el tiempo de residencia media del reactor.

$$\begin{aligned} \frac{dT_r}{dt} = & \frac{T_{rf} - T_r}{\theta_r} + \frac{(-\Delta H_{paa})k_{paa}C_aC_a^* + (-\Delta H_{pba})k_{pba}C_aC_b^*}{\rho_r c_{pr}} \\ & + \frac{(-\Delta H_{pab})k_{pab}C_bC_a^* + (-\Delta H_{pbb})k_{pbb}C_bC_b^*}{\rho_r c_{pr}} - \frac{U_r S_r (T_r - T_j)}{V_r \rho_r c_{pr}} \quad T_r(0) = T_{r0} \end{aligned} \quad (27)$$

donde C_a^* y C_b^* son las concentraciones de radicales terminados en unidades monoméricas a y b , respectivamente.

Balances para el Separador y el Tanque de Almacenamiento:

$$\frac{dC_{kv}}{dt} = \frac{C_{kvf} - C_{kv}}{\theta_v} \quad C_{kv}(0) = C_{kv0} \quad k = a, b, s, z \quad v = \text{separador, tanque} \quad (28)$$

El modelo utilizado es una generalización de otros aparecidos en la literatura y que han sido verificados experimentalmente (Congalidis y col, 1989).

La implementación de los algoritmos se desarrolló en la plataforma MatLab® R2007b. Se consideraron como medidas la temperatura del reactor, la conversión total, la composición del polímero y los pesos moleculares promedio en número (Mn) y en peso (Mw).

El vector de estados está sujeto a un ruido blanco de media cero y covarianza

$$Q = \text{diag}\{5e-6, 5e-6, 5e-6, 5e-10, 5e-6, 0, 1e-16, 1e-8, 1e-8, 5e-12, 5e-6, 5\}.$$

Las medidas presentan un ruido blanco de media cero y covarianza

$$R = \text{diag}\{0.002; 1; 0.002; 1; 5\}.$$

Los parámetros del filtro son: $\hat{x}_0 = [2e-2; 5; 1e-4; 2; 2; 0; 340; 8e-2; 6e-2; 6e-4; 1e1; 4e3]$

y $P_0 = [1e-4; 1e-4; 1e-4; 1e-4; 1e-4; 1E-10; 1; 1E-4; 1E-4; 1E-10; 1E-4; 100]$.

En la Fig. 3 se representa, para la conversión total, la diferencia entre el valor real y el estimado utilizando EKF y UKF. Se puede apreciar claramente el menor error producido por la estimación realizada con el UKF. Para las restantes medidas se obtuvieron resultados similares.

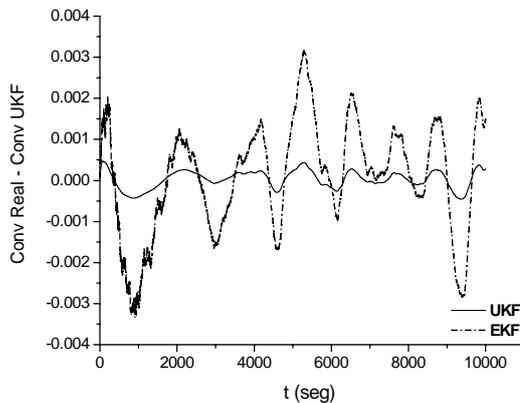


TABLA 1: Evaluadores de desempeño para ambos estimadores.

	EKF	UKF
LMS	3.34E-5	3.18E-6
IAE	2.37	0.693
T. C.	980	560

FIGURA 3: Diferencia Entre el valor real y el estimado para la conversión total en ambos estimadores

La Tabla 1 muestra tres medidas de desempeño: el error cuadrático medio (LMS), la integral del error absoluto (IEA) y el tiempo de computo en segundos (TC). Se observa que el desempeño del UKF es superior al del EKF.

Las evoluciones de los valores verdaderos y estimados con UKF para el peso molecular promedio en número y la temperatura se presentan en las Figs. 4 y 5. Estas muestran

que la respuesta del estimador aproxima satisfactoriamente los valores reales de estas variables.

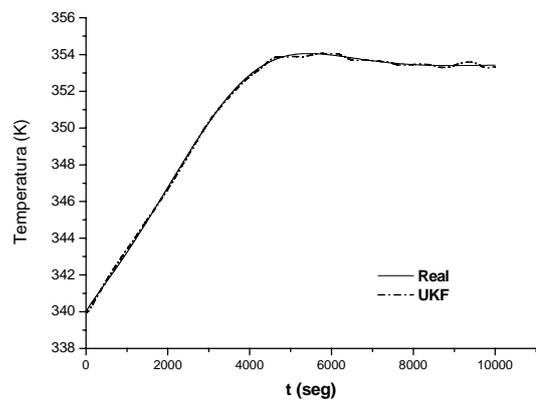
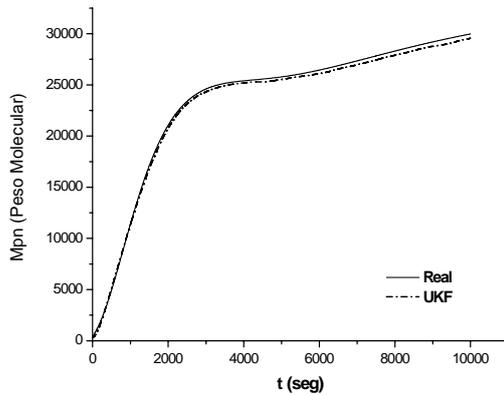


FIGURA 4: Estimación del peso Molecular Promedio en número con UKF **FIGURA 5:** Estimación de la Temperatura con UKF

6 - Conclusiones

En este trabajo se evaluó el desempeño del UKF para la estimación de estados en un proceso de polimerización en solución, encontrándose que esta herramienta provee una mejor precisión en comparación con un estimador clásico como el EKF. Además, la implementación del UKF es sencilla, su resolución no presenta complicaciones de tipo numérico, y requiere menor tiempo de cómputo que el EKF, lo cual evidencia un buen desempeño para lazos de DRTO.

7 – Bibliografía

- Congalidis, J. P.; Richards, J.; Ray, W. H. (1989) Feedforward and Feedback Control of a Solution Copolymerization Reactor. *AIChE Journal*, 35, 891-907.
- Julier, J. S.; Uhlmann, J. K. (2004) Unscented Filtering and Nonlinear Estimation. *Proceedings of the IEEE*, 92, 3.
- Julier, J. S.; Uhlmann, J. K. (1997) A New Extension of the Kalman Filter to Nonlinear Systems. *Proc. SPIE*, 3068, 182.
- Romanenko, A.; Castro, J. M. (2004) The Unscented Filter as an Alternative to the EKF for Nonlinear State Estimation: A Simulation Case Study. *Computers and Chemical Engineering*, 28, 347-355.
- Sarkka, S. (2007) On Unscented Kalman Filtering for State Estimation of Continuous Time Nonlinear Systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*.
- Tudoroiu, N.; Khorasani, K. (2005) State Estimation of Vinyl Acetate Reactor Using Unscented Kalman Filters (UKF). *IEEE*.
- Van der Merwe; Wan, R. E. A. The Unscented Kalman Filter for Nonlinear Estimation. *Oregon Institute of Science and Technology*.
- Van der Merwe, Wan R. E. A. (2005) Unscented Kalman Filter". *Kalman Filtering and Neural Networks*. S. Haykin, Ed. Wiley, Ch7