



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería en Electricidad y Computación



“ESTIMACIÓN NOLINEAL DE ESTADOS EN UN REACTOR QUÍMICO
EMPLEANDO MÉTODOS SECUENCIALES DE MONTE CARLO”

TRABAJO DE TITULACIÓN

Previo a la obtención del Título de:

MAGÍSTER EN AUTOMATIZACIÓN Y CONTROL INDUSTRIAL

Presentado por:

Jorge Armando Estrada Méndez

Yuber Antonio Robalino Murillo

Guayaquil – Ecuador

2019

AGRADECIMIENTO

Jorge Estrada

Agradezco por todo el apoyo brindado a mi mami Emiliana Mendez a pesar de ser su nieto dio todo por mi, Dios la bendiga siempre.

A mis hijas por ser la fortaleza de mi vida.

A mi tía Josefina Estrada que siempre ha estado conmigo dandome su apoyo.

A mi mama que esta arriba en el cielo cuidandome en cada paso que doy.

Yuber Robalino

Agradezco a Dios por darme salud y fuerzas para seguir en el día día.

Agradezco a mi mamá Emilia Murillo por su ayuda y apoyo incondicional en todo momento. Agradezco a mi esposa Raquel Burbano por ser mi ayuda idónea.

Agradezco a mis hijos Carlos Andrés y Diego Sebastian por llenar mi vida de felicidad.

Agradezco a mis hermanos Guillermo, Yadira y Sara por su ayuda y apoyo en este proceso

DEDICATORIA

*Este trabajo está dedicado a nuestros
padres, esposas, hijos y familiares.*

TRIBUNAL DE SUSTENTACIÓN

PhD. César Martín

SUBDECANO FIEC

PhD. Douglas Plaza Guingla

DIRECTOR

MSc. Ronald Solís

VOCAL PRINCIPAL

DECLARACIÓN EXPRESA

La responsabilidad y la autoría del contenido de este Trabajo de Titulación me corresponde exclusivamente; y doy mi consentimiento para que la ESPOL realice la comunicación pública de la obra por cualquier medio con el fin de promover la consulta, difusión y uso público de la producción intelectual.

(Reglamento de Graduación de la ESPOL)

Jorge Armando Estrada Méndez

Yuber Antonio Robalino Murillo

RESUMEN

En el presente trabajo se desarrolla el análisis comparativo entre dos filtros no lineales, ambas técnicas están basadas en las ecuaciones del filtro discreto de Kalman para sistemas lineales. Uno de los emplea una aproximación hacia una estimación óptima mediante linealización extendida y el segundo de igual manera pero emplea técnicas de Monte Carlo en la aproximación.

El desarrollo de las ecuaciones de los filtros basadas en fundamentos probabilísticos es presentado en el Capítulo 2. Las técnicas, tal cual se presentan, son aproximaciones a la implementación del filtro de Bayes.

El Capítulo 3 se centra en la presentación de el modelo matemático en representación en espacio de estados de un reactor químico empleado en nuestro caso de estudio en la producción de glicol de propileno. Sustancia de relevancia en los productos químicos y materia prima en la elaboración de cremas, pastas, etc.

En el capítulo final presentamos la comparación del desempeño de las técnicas empleadas considerando métodos visuales y a través de métricas del error para determinar el grado de precisión de los estimadores.

ÍNDICE GENERAL

Agradecimiento	II
Dedicatoria	IV
Tribunal de Graduación	V
Declaración Expresa	VI
Resumen	VII
Índice General	VIII
Tribunal de Graduación	X
Índice de figuras	X
Índice de tablas	XII
Introducción	XIII
1 Antecedentes	1
1.1 Descripción del problema	1
1.2 Justificación	2
1.3 Objetivos	2
1.4 Metodología	2
1.4.1 El filtro de Kalman extendido.	3

1.4.2	El filtro de Kalman por ensamble de partículas.	3
2	Metodologías	4
2.1	El Filtro de Kalman	8
2.1.1	Introducción	8
2.1.2	Fundamento probabilístico del filtro de Kalman lineal . . .	10
2.2	El filtro extendido de Kalman (EKF)	14
2.2.1	Introduction	14
2.2.2	Fundamentos probabilísticos del filtro de Kalman extendido	15
2.3	El filtro de Kalman por ensamble de partículas (EnKF)	21
2.3.1	Fundamento probabilístico del EnKF	21
3	Modelaje e implementación de los filtros	29
3.1	Modelaje del Reactor químico	29
3.2	CSTR representado en espacio de estados	30
3.3	Discretización del modelo del CSTR	34
3.4	Simulación del CSTR en MATLAB script	35
3.4.1	Generación de las mediciones empleadas en el estudio .	39
4	Análisis Comparativo del desempeño de los filtros	43
4.1	Implementación del Filtro Extendido de Kalman	43
4.2	Implementación del Ensemble Kalman Filter	48
4.3	Análisis Comparativo	52
	Conclusiones y Recomendaciones	55
	Bibliografía	56

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 3.1	Gráfica de la variable de entrada Coolant Flow Rate . . .	36
Figura 3.2	Gráfica de la variable de entrada Product Flow Rate . . .	36
Figura 3.3	Gráfica de la variable de entrada Feed Flow Rate	37
Figura 3.4	Gráfica del estado Product Concentration	38
Figura 3.5	Gráfica del estado Reactor Temperature	38
Figura 3.6	Gráfica del estado Outlet Coolant Temperature	39
Figura 3.7	Gráfica del estado Reactor Volume	39
Figura 3.8	Gráfica del estado Product Concentration	40
Figura 3.9	Gráfica del estado Reactor Temperature	41
Figura 3.10	Gráfica del estado Outlet Coolant Temperature	41
Figura 3.11	Gráfica del estado Reactor Volume	42
Figura 4.1	Estimación EKF del estado Product Concentration . . .	47
Figura 4.2	Estimación EKF del estado Reactor Temperature	47
Figura 4.3	Estimación EKF del estado Outlet Coolant Temperature .	48
Figura 4.4	Estimación EKF del estado Reactor Volume	48
Figura 4.5	Estimación EnKF del estado Product Concentration . . .	51
Figura 4.6	Estimación EnKF del estado Reactor Temperature . . .	51
Figura 4.7	Estimación EnKF del estado Outlet Coolant Temperature	52
Figura 4.8	Estimación EnKF del estado Reactor Volume	52
Figura 4.9	Estimación tanto EnKF como EKF del estado Product Concentration	53

Figura 4.10	Estimación tanto por EnKF como EKF del estado Reac- tor Temperature	53
Figura 4.11	Estimación tanto del EnKF como el EKF del estado Outlet Coolant Temperature	54
Figura 4.12	Estimación tanto del EnKF como el EKF del estado Reac- tor Volume	54

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 3.1	Variables de entrada del CSTR.	30
Tabla 3.2	Valores de los parámetros del CSTR.	31
Tabla 3.3	Variables del CSTR.	31
Tabla 3.4	Variables de salida del CSTR.	31
Tabla 3.5	Entradas en espacio de estados.	32
Tabla 3.6	Variables del CSTR.	32
Tabla 3.7	Variables de salida del CSTR.	32
Tabla 3.8	Variables de salida del CSTR.	40
Tabla 4.1	Variables del CSTR.	54

INTRODUCCIÓN

El reactor químico es una herramienta de producción indispensable en la industria química, el entorno de operación del reactor afecta directamente sobre la eficiencia de la producción y la calidad del producto. Reactores de Agitación Continua (CSTR, de sus siglas en ingles), son los reactores de mayor uso en la producción industrial. El reactor es un sistema complejo y altamente no lineal.

El conocer el comportamiento dinámico de las variables físicas internas del reactor es de vital importancia para desarrollar lazos de control eficientes o también para aplicaciones en detección de fallos al sistema.

El presente trabajo evalúa el desempeño con respecto al grado de precisión de dos filtros no lineales como son el filtro de Kalman extendido (EKF) y el filtro de Kalman de ensamble de partículas (EnKF). Ambos métodos aplicados en la estimación de las variables de estado del reactor químico.

Los resultados muestran un mejor desempeño del EnKF comparado con el EKF en la reconstrucción de los valores verdaderos de los estados del reactor.

Capítulo 1

1. Antecedentes

1.1. Descripción del problema

La industria química juega un rol importante en la economía de nuestro país. Los reactores químicos forman parte importante en el proceso de producción de la industria. Entre los reactores más empleados tenemos al reactor de agitación continua (CSTR). El reactor en mención presenta características complejas como por ejemplo las no linealidades presentes en las reacciones producidas dentro del reactor [17]. Las variables mayormente relacionadas son las concentraciones de los reactivos y los productos. Como es de conocimiento, la instrumentación relacionada a la industria química es costosa y en ciertas ocasiones escasa. Por esta razón la estimación de estados permite reconstruir la dinámica de variables no medidas a partir de variables medidas [5],[9].

1.2. Justificación

Sistemas de supervisión en línea son de vital importancia en el control de reactores CSTR. La estimación no lineal de estados permite conocer el comportamiento de todas las variables de estado de los reactores CSTR.

1.3. Objetivos

Analizar el desempeño del filtro de partículas en la estimación no lineal de estados en un reactor químico de agitación continua (CSTR).

- Implementar un modelo matemático del CSTR.
- Implementar el filtro extendido de Kalman.
- Implementar el filtro de Kalman de ensamble.
- Realizar un análisis comparativo del desempeño de los filtros EKF y ENKF mediante simulación.

1.4. Metodología

En el presente trabajo se emplearán dos técnicas no lineales una de ellas Gaussiana y la otra No-Gaussiana en la estimación de estados.

1.4.1. El filtro de Kalman extendido.

Este filtro emplea las mismas ecuaciones del filtro de Kalman lineal que se implementaciónn en los dos pasos del filtro: predicción y corrección. La diferencia radica en la linealización aproximada del sistema no lineal para obtener las matrices necesarias para determinar la ganancia de Kalman.

1.4.2. El filtro de Kalman por ensamble de partículas.

Es un método no lineal no-Gaussiano aproximado en cual la estimación del mejor valor esperado de los estados es obtenida mediante la implementación del filtro de Bayes utilizando métodos secuenciales de Monte Carlo.

Capítulo 2

2. Metodologías

Estimación Recursiva Bayesiana define un marco referencial probabilístico el cual permite resolver de manera recursiva el problema de la estimación de estados. Se emplean las funciones de probabilidad condicionales involucradas en la estimación.

Inferencia de Estados también es conocida como Estimación de Estados [19]. La estimación de estados consiste en la estimación del valor del estado de forma instantánea considerando las mediciones contenidas hasta el instante actual.

En el contexto de inferencia bayesiana, la inferencia de $\mathbf{x}_{1:t}$ dado $\mathbf{y}_{1:t}$ depende de la probabilidad a-posteriori de acuerdo a:

$$p(\mathbf{x}_{1:t}|\mathbf{y}_{1:t}) = \frac{p(\mathbf{y}_{1:t}|\mathbf{x}_{1:t})p(\mathbf{x}_{1:t})}{p(\mathbf{y}_{1:t})} \quad (2.1)$$

donde,

$$p(\mathbf{y}_{1:t}) = \int p(\mathbf{y}_{1:t}|\mathbf{x}_{1:t})p(\mathbf{x}_{1:t})d\mathbf{x}_{1:t} \quad (2.2)$$

La expresión recursiva de la ecuación (2.1) es la siguiente:

$$p(\mathbf{x}_{1:t}|\mathbf{y}_{1:t}) = p(\mathbf{x}_{1:t-1}|\mathbf{y}_{1:t-1}) \frac{p(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1})p(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t)}{p(\mathbf{y}_t|\mathbf{y}_{1:t-1})} \quad (2.3)$$

donde,

$$p(\mathbf{y}_t|\mathbf{y}_{1:t-1}) = \int p(\mathbf{x}_{1:t-1}|\mathbf{y}_{1:t-1})p(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1})p(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t)d\mathbf{x}_{t-1:t} \quad (2.4)$$

El problema de resolver la ecuación (2.3) es referido en la literatura como el problema de filtrado óptimo. La distribución de probabilidad a-posteriori $p(\mathbf{x}_{1:t}|\mathbf{y}_{1:t})$ es también conocida como la distribución suavizada. La ecuación (2.3) puede ser descompuesta en dos partes o pasos: La fase de actualización con respecto al tiempo de los estados del sistema (predicción) y la fase de actualización basa en las mediciones (corrección).

La actualización de los estados corresponde a la estimación de la distribución de probabilidad de los primeros t estados dado únicamente las $t - 1$ mediciones.

$$p(\mathbf{x}_{1:t}|\mathbf{y}_{1:t-1}) = p(\mathbf{x}_{1:t-1}|\mathbf{y}_{1:t-1})p(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1}) \quad (2.5)$$

La actualización de los estados dadas las mediciones está relacionada con la corrección de distribución de probabilidad de predicción basada en la información de las mediciones actuales.

$$p(\mathbf{x}_{1:t}|\mathbf{y}_{1:t}) = \frac{p(\mathbf{x}_{1:t}|\mathbf{y}_{1:t-1})p(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t)}{\int p(\mathbf{x}_{1:t}|\mathbf{y}_{1:t-1})p(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t)d\mathbf{x}_{1:t}} \quad (2.6)$$

Generalmente las distribuciones de probabilidad de suavizado y de predicción son también de interés. En el suavizado, el objetivo es estimar la distribución de algunos estados condicionados en el conocimiento de mediciones. Formalmente, suavizado es la estimación de $p(\mathbf{x}_{l:k}|\mathbf{y}_{0:t})$ cuando $l \leq k \leq t$ y esta distribución es obtenida por medio del principio de suavizado, de acuerdo al

siguiente procedimiento:

$$p(\mathbf{x}_{l:k}|\mathbf{y}_{1:t}) = \int p(\mathbf{x}_{1:t}|\mathbf{y}_{1:t})d\mathbf{x}_{1:l-1}d\mathbf{x}_{k+1:t} \quad (2.7)$$

En el problema de predicción, la distribución probabilística de algún grupo de estados futuros es estimada condicionalmente al conocimiento de las observaciones hasta el tiempo actual. La predicción puede ser vista como la estimación de $p(\mathbf{x}_{l:k}|\mathbf{y}_{1:t})$ cuando $t \leq k$ y $l \leq k$ y $l = 1$, la distribución de probabilidad es calculada de la siguiente manera:

$$p(\mathbf{x}_{1:k}|\mathbf{y}_{1:t}) = p(\mathbf{x}_{1:t}|\mathbf{y}_{1:t}) \prod_{j=t+1}^k p_j(\mathbf{x}_j|\mathbf{x}_{j-1}) \quad (2.8)$$

La distribución a-posteriori de interés en el presente trabajo es la distribución marginal la cual es conocida como la distribución de filtrado. Esta distribución se la obtiene mediante la integración $\mathbf{x}_{1:t-1}$ de 2.5 y considerando la propiedad Marcoviana. El resultado de esta integración es el famoso filtro de Bayes el cual es presentado en el algoritmo 1.

Algorithm 1 Bayes' filter

For $t = 1$ to the number of time steps

1. Forecast step:

$$\overbrace{p(\mathbf{x}_t|\mathbf{y}_{1:t-1})}^{\text{predictive}} = \int \overbrace{p(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1})}^{\text{transition}} p(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{y}_{1:t-1})d\mathbf{x}_{t-1}$$

2. Analysis step:

$$\overbrace{p(\mathbf{x}_t|\mathbf{y}_{1:t})}^{\text{filtering}} = \frac{\overbrace{p(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t)}^{\text{likelihood}} p(\mathbf{x}_t|\mathbf{y}_{1:t-1})}{\int p(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t)p(\mathbf{x}_t|\mathbf{y}_{1:t-1})d\mathbf{x}_t}$$

El algoritmo 1 presenta un conjunto de distribuciones de probabilidad condicionales (pdfs) las cuales definen la solución conceptual del problema de estima-

ción. En el paso de actualización basado en modelo, la distribución de predicción es obtenida por medio de una combinación de nuestro mejor conocimiento del estado del sistema. Esto se lo logra a través del modelo (probabilidad de transición) y el conocimiento del estado del estado un instante de tiempo antes del sistema. Conocimiento plasmado en la distribución a-posteriori en un delta $t - 1$. Luego, la pdf de filtrado es actualizada basada en la información de las nuevas mediciones de las salidas al tiempo t . Esto ocurre durante el paso de corrección. La distribución predictiva actualizada es mencionada como la probabilidad pdf de filtrado y es la pdf a-posteriori de interés en el presente trabajo.

Los métodos de estimación recursiva Bayesiana son implementaciones numéricas del filtro teórico de Bayes. Estos métodos puede ser clasificados dentro de dos grupos: métodos óptimos y métodos subóptimos o aproximados. Los filtros óptimos son aquellos que resuelven el filtro teórico siguiendo un mecanismo analítico. Dentro los filtros óptimos, el filtro más representativo es el filtro de Kalman [14], filtro que es desarrollada en la sección ???. La solución óptima existe en los casos que los sistemas de estudio sean del tipo lineal y comportamiento de la incertidumbre Gaussiana donde tanto la pdf predictiva como la pdf de filtrado son representadas mediante distribuciones Gaussianas para cada instante de tiempo. En estos casos, el únicamente contar con los valores medios del vector de estados y la matriz de covarianzas entre los estados ya podemos representar completamente las distribuciones de probabilidad de nuestro interés.

Cuando un sistema deja de ser lineal y su comportamiento es no lineal entonces tenemos que aplicar al problema de estimación las técnicas aproximadas para poder implementar el filtro de Bayes en estos casos. Vale la pena resaltar que problemas de estimación no lineal generalmente no presentan soluciones

analíticas. Uno de los métodos aproximados no lineal empleado en el campo de la ingeniería es el filtro de Kalman extendido [19, ch. 13] el cual aproxima el filtro de Bayes mediante una linealización local del sistema no lineal real. Para sistemas con una cantidad considerable en el número de estados, en los cuales la demanda o carga computacional es grande, existen métodos de estimación en los cuales no es necesario evaluar complejas matrices que representan a la derivada parcial del sistema. Estas técnicas han permitido llevar adelante estimaciones de estados en sistemas complejos, técnicas como el Unscented Kalman Filter [11] entre otros [10, 16].

Otro conjunto de algoritmos de estimación no lineal emplea la aproximación de las integrales involucradas en el filtro de Bayes. Ejemplos de este tipo de filtros corresponden al Ensemble Kalman Filter (EnKF) [6] y al filtro de partículas [7]. En el EnKF, la matriz de covarianzas es aproximada por la covarianza de un conjunto de muestras que son el resultado de realizaciones aleatorias del modelo matemático del sistema. Mientras que el filtro de partículas emplea técnicas secuenciales de Monte Carlo.

2.1. El Filtro de Kalman

2.1.1. Introducción

En el presente trabajo, filtro de Kalman original para procesos Gaussianos se lo obtiene mediante un desarrollo probabilístico a partir de la teoría recursiva Bayesiana. Este marco de trabajo hace visible o expone de mejor manera al lector el fundamento probabilístico de este filtro ampliamente utilizado y muchas veces poco entendido. En términos técnicos, el sistema que se considera para el desarrollo del filtro de Kalman lineal es un sistema estocástico lineal donde lo

estocástico del sistema está dado por la representación de la incertidumbre del modelo y de las mediciones a través de distribuciones de probabilidad Gaussianas. Adicionalmente, las incertidumbres son representadas matemáticamente por ruido blanco. Entonces estos ruidos tienen como valor de su media cero y no están correlacionados en ningún instante de tiempo t , siendo t el índice de tiempo discreto.

El modelo en espacio de estados obtenido a partir de las ecuaciones (??) y (??) es presentado a continuación:

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{F}_{t,t-1}\mathbf{x}_{t-1} + \mathbf{B}_{t-1}\mathbf{u}_{t-1} + \mathbf{w}_t \quad (2.9)$$

$$\mathbf{y}_t = \mathbf{H}_t\mathbf{x}_t + \mathbf{v}_t \quad (2.10)$$

donde los ruidos del proceso y de las mediciones corresponden a ruidos Gaussianos:

$$\mathbf{w}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{w}_t : \mathbf{0}, \mathbf{Q}_t) \quad (2.11)$$

$$\mathbf{v}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{v}_t : \mathbf{0}, \mathbf{R}_t) \quad (2.12)$$

donde la notación $\mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mu, \Sigma)$ es utilizado para representar distribuciones Gaussianas con \mathbf{x} el vector aleatorio con media μ y matriz de covarianza Σ . Las propiedades estadísticas de los vectores aleatorios son las siguientes:

$$E[\mathbf{w}_t] = \mathbf{0} \quad , \quad E[\mathbf{v}_t] = \mathbf{0}, \quad (2.13)$$

$$E[\mathbf{w}_t\mathbf{w}_{t+k}^T] = \mathbf{0} \quad , \quad E[\mathbf{w}_t\mathbf{w}_t^T] = \mathbf{Q}_t, \quad (2.14)$$

$$E[\mathbf{v}_t\mathbf{v}_{t+k}^T] = \mathbf{0} \quad , \quad E[\mathbf{v}_t\mathbf{v}_t^T] = \mathbf{R}_t, \quad (2.15)$$

$$E[\mathbf{w}_t\mathbf{v}_{t+k}^T] = \mathbf{0} \quad , \quad E[\mathbf{w}_t\mathbf{v}_t^T] = \mathbf{0} \quad (2.16)$$

donde \mathbf{Q} y \mathbf{R} son matrices de covarianzas positivas para el proceso y ruidos de instrumentación, respectivamente y k es un entero positivo.

2.1.2. Fundamento probabilístico del filtro de Kalman lineal

El algoritmo recursivo se lo obtiene a partir de la información disponible en los pasos de tiempo previos. La siguiente expresión es válida considerando las propiedades Gaussianas del sistema estocástico bajo estudio.

$$p(\mathbf{x}_{t-1} | \mathbf{y}_{1:t-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_{t-1} : \mathbf{x}_{t-1}^a, \mathbf{P}_{t-1}^a) \quad (2.17)$$

donde \mathbf{x}_{t-1} corresponde al vector de estados verdadero, \mathbf{x}_{t-1}^a y \mathbf{P}_{t-1}^a son el vector de estados y la matriz de covarianza, obtenidas ambos del paso de análisis en el paso de tiempo $t - 1$. Aunque la fase de análisis no se la ha definido formalmente aún, hasta este momento consideramos que \mathbf{x}_{t-1}^a and \mathbf{P}_{t-1}^a son conocidos.

Fase de Pronóstico

Guardando concordancia con el filtro de Bayes presentado en el algoritmo 1, el primer paso en la obtención del filtro óptimo de Kalman es el cálculo de la pdf apriori en el paso de tiempo t :

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1}) = \int p(\mathbf{x}_t | \mathbf{x}_{t-1}) p(\mathbf{x}_{t-1} | \mathbf{y}_{1:t-1}) d\mathbf{x}_{t-1} \quad (2.18)$$

En la ecuación 2.18, la pdf apriori está determinada por la pdf de transición y la pdf de filtrado (aposteriori). En otras palabras, la pdf apriori es calculada basada en toda la información disponible y conocida de antemano. Esto es, la información obtenida del modelo y la predicción estimada un paso de tiempo

hacia atrás, es decir a $t - 1$. La pdf de filtrado en el paso de tiempo $t - 1$ fue presentada en la ecuación 2.17 y la probabilidad de transición se calcula de $t - 1$ de la siguiente manera:

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{x}_{t-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mathbf{F}_{t,t-1} \bar{\mathbf{x}}_{t-1}, \mathbf{Q}_t) \quad (2.19)$$

donde $\bar{\mathbf{x}}_{t-1}$ es el valor esperado del estado $E[\mathbf{x}_{t-1}]$. El termino correspondiente a las entradas en la ecuación $E[\mathbf{x}_{t-1}]$ no es considerada en el desarrollo del filtro. Adicionalmente, la ausencia de este termino no afecta a la formulación razón por la cual es removida y no se la considera en los siguientes capítulos. Se puede mostrar que la pdf predictiva (ecuación 2.18) esta distribuida de acuerdo a una función de probabilidad Gaussiana. Lo que se acaba de mencionar es demostrable cuando las distribuciones Gaussianas presentadas en las ecuaciones 2.17 y 2.19 son sustituidas por la función exponencial que caracteriza a la campana de Gauss. También es necesario una manipulación algebraica matricial. Las propiedades estadísticas de las probabilidades son mostradas a continuación:

$$\mathbf{x}_t^f = \mathbf{F}_{t,t-1} \mathbf{x}_{t-1}^a, \quad (2.20)$$

$$\mathbf{P}_t^f = \mathbf{F}_{t,t-1} \mathbf{P}_{t-1}^a \mathbf{F}_{t,t-1}^T + \mathbf{Q}_t \quad (2.21)$$

con \mathbf{x}_t^f el vector de estados de pronóstico y \mathbf{P}_t^f la coarianza del error de pronóstico. matriz $\mathbf{P}_t^f = E[\mathbf{x}_t^f - \bar{\mathbf{x}}_t][\mathbf{x}_t^f - \bar{\mathbf{x}}_t]^T$.

Fase de Análisis

En la fase de análisis, la pdf apriori es actualizada con la última medición la cual es obtenida en el paso de tiempo t . En plena concordancia con el algoritmo

1, las distribuciones actualizada y apriori están determinadas por la ecuación 2.22.

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t}) = \frac{p(\mathbf{y}_t | \mathbf{x}_t) p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1})}{\int p(\mathbf{y}_t | \mathbf{x}_t) p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1}) d\mathbf{x}_t} \quad (2.22)$$

La distribución apriori es actualizada basada en la información de la probabilidad de coincidencia. En nuestro caso la probabilidad de coincidencia es Gaussiana, tal que:

$$p(\mathbf{y}_t | \mathbf{x}_t) = \mathcal{N}(\mathbf{y}_t : \mathbf{H}_t \bar{\mathbf{x}}_t, \mathbf{R}_t) \quad (2.23)$$

Substituyendo la ecuación 2.23 en 2.22, la siguiente expresión es obtenido de:

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t}) = \frac{\mathcal{N}(\mathbf{y}_t : \mathbf{H}_t \bar{\mathbf{x}}_t, \mathbf{R}_t) \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mathbf{x}_t^f, \mathbf{P}_t^f)}{\int \mathcal{N}(\mathbf{y}_t : \mathbf{H}_t \bar{\mathbf{x}}_t, \mathbf{R}_t) \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mathbf{x}_t^f, \mathbf{P}_t^f) d\mathbf{x}_t} \quad (2.24)$$

Puede ser mostrado que la integración del denominador en la ecuación 2.24 es distribuido acorde a una distribución Gaussiano, tal que:

$$\int \mathcal{N}(\mathbf{y}_t : \mathbf{H}_t \bar{\mathbf{x}}_t, \mathbf{R}_t) \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mathbf{x}_t^f, \mathbf{P}_t^f) d\mathbf{x}_t = \mathcal{N}(\mathbf{y}_t; \mathbf{H}_t \mathbf{x}_t^f, \mathbf{H}_t \mathbf{P}_t^f \mathbf{H}_t^T + \mathbf{R}_t) \quad (2.25)$$

Aqui, luego de algunas operaciones algebraicas, ecuación 2.24 pueden ser reducido a:

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mathbf{x}_t^a, \mathbf{P}_t^a) \quad (2.26)$$

donde

$$\mathbf{x}_t^a = \mathbf{x}_t^f + \mathbf{K}_t (\mathbf{y}_t - \mathbf{H}_t \mathbf{x}_t^f), \quad (2.27)$$

$$\mathbf{P}_t^a = \mathbf{P}_t^f - \mathbf{K}_t \mathbf{H}_t \mathbf{P}_t^f, \quad (2.28)$$

con

$$\mathbf{K}_t = \mathbf{P}_t^f \mathbf{H}_t^T [\mathbf{H}_t \mathbf{P}_t^f \mathbf{H}_t^T + \mathbf{R}_t]^{-1} \quad (2.29)$$

Resumen del filtro de Kalman lineal

Los pasos recursivos del filtro de Kalman para sistemas lineales/Gaussianos están resumidos como sigue.

Algorithm 2 Discrete Kalman Filter

For $t = 1$ to the number of time steps

1. Forecast step:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_t^f &= \mathbf{F}_{t,t-1} \mathbf{x}_{t-1}^a \\ \mathbf{P}_t^f &= \mathbf{F}_{t,t-1} \mathbf{P}_{t-1}^a \mathbf{F}_{t,t-1}^T + \mathbf{Q}_t \end{aligned}$$

2. Analysis step:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_t &= \mathbf{P}_t^f \mathbf{H}_t^T [\mathbf{H}_t \mathbf{P}_t^f \mathbf{H}_t^T + \mathbf{R}_t]^{-1} \\ \mathbf{x}_t^a &= \mathbf{x}_t^f + \mathbf{K}_t (\mathbf{y}_t - \mathbf{H}_t \mathbf{x}_t^f) \\ \mathbf{P}_t^a &= \mathbf{P}_t^f - \mathbf{K}_t \mathbf{H}_t \mathbf{P}_t^f \end{aligned}$$

El algoritmo 2 es la solución óptima a la estimación de estados para los procesos Gaussianos del tipo descritos en ecuaciones (2.9 - 2.16). La solución analítica del filtro de Bayes es posible debido a que las distribuciones involucradas pueden ser tratadas analíticamente mediante el uso de sus medias y covarianzas. El vector de estados actualizado \mathbf{x}_t^a está dado mediante la suma del paso de pronóstico \mathbf{x}_t^f y los residuos ponderados $(\mathbf{y}_t - \mathbf{H}_t \mathbf{x}_t^f)$. Los residuos están ponderados de acuerdo a la ganancia de Kalman \mathbf{K}_t . Para poder realizar el cálculo de la ganancia de Kalman es necesario que las matrices de la covarianza del error ($\mathbf{P}_t^a, \mathbf{P}_t^f$) sean simétricas y positivas. Sin embargo, en sistemas con un número de estados grande, estas propiedades pueden no ser preservadas debido a la precisión computacional finita. Por tanto, el desempeño del filtro puede ser robustecido mediante la adopción del Square Root Kalman filter [19, ch. 6]. Método que utiliza las matrices cuadradas de las matrices de

covarianza del error y el filtro de Kalman con memoria [19, ch. 7] el cual utiliza el principio de inflación de la matriz de covarianza.

2.2. El filtro extendido de Kalman (EKF)

2.2.1. Introduction

La observación y la estimación a posteriori de los estados en sistemas de nuestra naturaleza es una tarea compleja ya que muchos o todos los fenómenos físicos que nos rodean son de naturaleza no lineal. Sin embargo, si consideramos no linealidades suaves, entonces es posible aplicar métodos de la teoría de estimación lineal. Para poder aplicar métodos lineales deberemos primero aproximar linealmente al sistema no lineal, para lo cual deberemos definir puntos de operación del sistema en estudio. En algunos casos, la trayectoria nominal que seguirán los estados es conocida de antemano. Para este tipo de sistemas, el problema de estimación comúnmente puede ser abordado mediante una linealización efectiva alrededor de la trayectoria nominal y las ganancias de Kalman pueden ser pre-calculadas en aras de reducir la demanda computacional. Por otro lado, cuando la trayectoria nominal es desconocida entonces esta puede ser redefinida en cada paso de tiempo como el mejor valor estimado de la trayectoria actual. La mayor desventaja será entonces la mayor demanda computacional de realizar la linealización en cada paso de tiempo. Estas técnicas son referidas como el Filtro Extendido de Kalman (EKF).

El siguiente sistema no lineal es considerado en el desarrollo del EKF em-

pleando RBE:

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1}) + \mathbf{w}_t \quad (2.30)$$

$$\mathbf{y}_t = \mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t) + \mathbf{v}_t \quad (2.31)$$

Las distribuciones y estadísticas de los ruidos tanto del proceso como de las mediciones son presentadas como sigue:

$$\mathbf{w}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{w}_t : \mathbf{0}, \mathbf{Q}_t) \quad (2.32)$$

$$\mathbf{v}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{v}_t : \mathbf{0}, \mathbf{R}_t) \quad (2.33)$$

$$E[\mathbf{w}_t] = \mathbf{0} \quad , \quad E[\mathbf{v}_t] = \mathbf{0}, \quad (2.34)$$

$$E[\mathbf{w}_t \mathbf{w}_{t+k}^T] = \mathbf{0} \quad , \quad E[\mathbf{w}_t \mathbf{w}_t^T] = \mathbf{Q}_t, \quad (2.35)$$

$$E[\mathbf{v}_t \mathbf{v}_{t+k}^T] = \mathbf{0} \quad , \quad E[\mathbf{v}_t \mathbf{v}_t^T] = \mathbf{R}_t, \quad (2.36)$$

$$E[\mathbf{w}_t \mathbf{v}_{t+k}^T] = \mathbf{0} \quad , \quad E[\mathbf{w}_t \mathbf{v}_t^T] = \mathbf{0} \quad (2.37)$$

los ruidos considerados son de tipo ruido blanco, con media cero y sin correlación $\forall t$ con $k \geq 0$.

2.2.2. Fundamentos probabilísticos del filtro de Kalman extendido

Considerando que el sistema no lineal en estudio ha sido linealizado antes de la fase de análisis, la pdf a posteriori en el paso de tiempo $t - 1$ puede ser aproximada mediante una distribución Gaussiana:

$$p(\mathbf{x}_{t-1} | \mathbf{y}_{1:t-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_{t-1} : \mathbf{x}_{t-1}^a, \mathbf{P}_{t-1}^a) \quad (2.38)$$

La principal diferencia entre la ecuación 2.17 y la ecuación 2.38 es el mismo

estado. En la ecuación 2.17, \mathbf{x}_t representa todas las posibles trayectorias de los estados, mientras que en la ecuación 2.38, el vector de estados representa solo la trayectoria particular en la cual el sistema es linealizado. Adicionalmente, la pdf a posteriori es aproximada como si fuese una distribución Gaussiana. El proceso de linealización es abordado en la siguiente sección.

Fase de Pronóstico

La fase de pronóstico esta dada por el cálculo de la pdf predictiva:

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1}) = \int p(\mathbf{x}_t | \mathbf{x}_{t-1}) p(\mathbf{x}_{t-1} | \mathbf{y}_{1:t-1}) d\mathbf{x}_{t-1} \quad (2.39)$$

La pdf a posteriori en el paso de tiempo $t - 1$ esta dada por la ecuación 2.38. La pdf de transición del lado de la ecuación 2.39 puede ser obtenida de la ecuación 2.30 y con la consideración de que esta pdf es Gaussiana:

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{x}_{t-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : E[\mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1})], \mathbf{Q}_t), \quad (2.40)$$

por tanto, la pdf predictiva está definida como:

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1}) = \int \mathcal{N}(\mathbf{x}_{t-1} : \mathbf{x}_{t-1}^a, \mathbf{P}_{t-1}^a) \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : E[\mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1})], \mathbf{Q}_t) d\mathbf{x}_{t-1} \quad (2.41)$$

La integral en la ecuación 2.41 es compleja de resolver debido a la presencia de la función no lineal $\mathbf{f}_{t,t-1}(\cdot)$. La formulación del problema es modificada para que se pueda obtener una solución analítica como por ejemplo el desarrollo de las ecuaciones del filtro de Kalman lineal (ecuaciones 2.20 y 2.21). La metodología adoptada en el desarrollo del filtro extendido de Kalman es la linealización a partir de expansiones de series de Taylor. Adicionalmente, la trayectoria del vector de estados debe ser definida alrededor de la cual es linealizada. Hasta

el momento, el mejor valor esperado del vector de estados está dado por \mathbf{x}_{t-1}^a . Expansiones en Series de Taylor de $\mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1})$ en los alrededores de $\mathbf{x}_{t-1}^a = E[\mathbf{x}_{t-1} | \mathbf{y}_{1:t-1}]$ es considerado en la linealización del sistema. Únicamente los dos primeros términos de la expansión son considerados:

$$\mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1}) \simeq \mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1}^a) + \mathbf{F}_{t,t-1}[\mathbf{x}_{t-1} - \mathbf{x}_{t-1}^a] \quad (2.42)$$

donde

$$\mathbf{F}_{t,t-1} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_{m_x}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_{m_x}}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_{m_x}}{\partial x_{m_x}} \end{bmatrix} | (\mathbf{x}_{t-1}^a) \quad (2.43)$$

es una matriz de Jacobianos con dimensión $(m_x \times m_x)$. El lado derecho de la ecuación 2.42 es desarrollado de la siguiente manera:

$$\mathbf{F}_{t,t-1}\mathbf{x}_{t-1} + \mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1}^a) + \mathbf{F}_{t,t-1}\mathbf{x}_{t-1}^a \quad (2.44)$$

donde el primer termino es lineal con respecto a \mathbf{x}_{t-1} y los siguientes dos términos corresponden a valores conocidos. La substitución de la ecuación 2.42 en 2.41,

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1}) = \int \mathcal{N}(\mathbf{x}_{t-1} : \mathbf{x}_{t-1}^a, \mathbf{P}_{t-1}^a) \cdots \mathcal{N}(\mathbf{x}_{t-1} : \mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1}^a) + \mathbf{F}_{t,t-1}[\mathbf{x}_{t-1} - \mathbf{x}_{t-1}^a], \mathbf{Q}_t) d\mathbf{x}_{t-1} \quad (2.45)$$

permite resolver la integral de manera analítica. Como resultado de la operación, la pdf apriori puede ser obtenida en forma Gaussiana como:

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mathbf{x}_t^f, \mathbf{P}_t^f) \quad (2.46)$$

Aunque la pdf apriori esta representada por una distribución Gaussiana, es importante resaltar el hecho de que esta representación es únicamente una aproximación local alrededor de una trayectoria nominal, por tanto, es solo una aproximación de la pdf verdadera, la cual no se la conoce de forma explícita. El vector de estado resultado de la fase de pronóstico \mathbf{x}_t^f y su matriz de covarianza del error \mathbf{P}_t^f son mayormente similares que en el caso del filtro de Kalman lineal y están dadas por:

$$\mathbf{x}_t^f = \mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1}^a) \quad (2.47)$$

$$\mathbf{P}_t^f = \mathbf{F}_{t,t-1}\mathbf{P}_{t-1}^a\mathbf{F}_{t,t-1}^T + \mathbf{Q}_t \quad (2.48)$$

El vector de estados luego de la fase de pronóstico se lo obtiene de la propagación de este vector a través del modelo no-lineal y para el cálculo de la matriz de covarianza entonces la matriz Jacobiana $\mathbf{F}_{t,t-1}$ es utilizada.

Fase de Análisis

La fase de análisis consiste en la actualización de la pdf apriori mediante:

$$p(\mathbf{x}_t|\mathbf{y}_{1:t}) = \frac{p(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t)p(\mathbf{x}_t|\mathbf{y}_{1:t-1})}{\int p(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t)p(\mathbf{x}_t|\mathbf{y}_{1:t-1})d\mathbf{x}_t} \quad (2.49)$$

Para el filtro de Kalman extendido, la pdf apriori es aproximada mediante una distribución Gaussiana la cual es caracterizada por la media 2.47 y la covarianza 2.48. La distribución de coincidencia es obtenida de la ecuación 2.31 asumiendo que esta distribución es también Gaussiana.

$$p(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t) = \mathcal{N}(\mathbf{y}_t : E[\mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t)], \mathbf{R}_t) \quad (2.50)$$

Mediante la sustitución de la ecuación 2.46 y la ecuación 2.50 en 2.49, la pdf

de filtrado estaría dada por:

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t}) = \frac{\mathcal{N}(\mathbf{y}_t : E[\mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t)], \mathbf{R}_t) \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mathbf{x}_t^f, \mathbf{P}_t^f)}{\int \mathcal{N}(\mathbf{y}_t : E[\mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t)], \mathbf{R}_t) \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mathbf{x}_t^f, \mathbf{P}_t^f) d\mathbf{x}_t} \quad (2.51)$$

donde el primer escollo en el cálculo de la pdf de filtrado es el de resolver la integral en el denominador de la expresión. En el afán de encontrar una solución analítica, el sistema de las mediciones es linealizado alrededor de la trayectoria de los estados. Hasta este punto, \mathbf{x}_t^f representa el mejor valor estimado. Por tanto el sistema de mediciones no lineal es linealizado empleando expansiones en series de Taylor en los alrededores de \mathbf{x}_t^f . La función no lineal se la expande de la siguiente manera:

$$\mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t) \simeq \mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t^f) + \mathbf{H}_t[\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^f] \quad (2.52)$$

donde \mathbf{H}_t es una matriz ($m_y \times m_x$) Jacobiana determinada por:

$$\mathbf{H}_t = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial h_1}{\partial x_{m_x}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial h_{m_y}}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial h_{m_y}}{\partial x_{m_x}} \end{bmatrix} |(\mathbf{x}_t^f) \quad (2.53)$$

Mediante la sustitución de la ecuación 2.52 en 2.51, la expresión para la pdf aposteriori es la siguiente:

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t}) = \frac{\mathcal{N}(\mathbf{y}_t : \mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t^f) + \mathbf{H}_t[\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^f], \mathbf{R}_t) \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mathbf{x}_t^f, \mathbf{P}_t^f)}{\int \mathcal{N}(\mathbf{y}_t : \mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t^f) + \mathbf{H}_t[\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^f], \mathbf{R}_t) \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mathbf{x}_t^f, \mathbf{P}_t^f) d\mathbf{x}_t} \quad (2.54)$$

Ahora, la solución de la integral es manejable y la expresión resultante para la pdf aposteriori en términos de una distribución es:

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_t^a, \mathbf{P}_t^a); \quad (2.55)$$

con

$$\mathbf{x}_t^a = \mathbf{x}_t^f + \mathbf{K}_t(\mathbf{y}_t - \mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t^f)), \quad (2.56)$$

$$\mathbf{P}_t^a = \mathbf{P}_t^f - \mathbf{K}_t \mathbf{H}_t \mathbf{P}_t^f, \quad (2.57)$$

y

$$\mathbf{K}_t = \mathbf{P}_t^f \mathbf{H}_t^T [\mathbf{H}_t \mathbf{P}_t^f \mathbf{H}_t^T + \mathbf{R}_t]^{-1} \quad (2.58)$$

Resumen del Filtro Extendido de Kalman

El filtro extendido de Kalman es presentado en el algoritmo 3.

Algorithm 3 Extended Kalman Filter

For $t = 1$ to the number of time steps

1. Forecast step:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_t^f &= \mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1}^a) \\ \mathbf{P}_t^f &= \mathbf{F}_{t,t-1} \mathbf{P}_{t-1}^a \mathbf{F}_{t,t-1}^T + \mathbf{Q}_t \end{aligned}$$

2. Analysis step:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_t &= \mathbf{P}_t^f \mathbf{H}_t^T [\mathbf{H}_t \mathbf{P}_t^f \mathbf{H}_t^T + \mathbf{R}_t]^{-1} \\ \mathbf{x}_t^a &= \mathbf{x}_t^f + \mathbf{K}_t(\mathbf{y}_t - \mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t^f)) \\ \mathbf{P}_t^a &= \mathbf{P}_t^f - \mathbf{K}_t \mathbf{H}_t \mathbf{P}_t^f \end{aligned}$$

En el algoritmo 3, las distribuciones de probabilidad involucradas son parametrizadas mediante los primeros dos momentos de las funciones de densidad: media y covarianza. Aunque esta caracterización puede no ser suficiente para sistemas específicos, el filtro extendido de Kalman ha mostrado un desempeño apropiado en un amplio rango de aplicaciones.

Una alternativa al filtro de Kalman extendido es del filtro de Kalman de segundo orden [19, ch. 13]. En esta filtro, durante la linealización se consideran los términos de segundo orden de las series de Taylor, términos que dan lugar a la aparición de las matrices Hessianas. Aunque la precisión del valor estimado

mejora, en cambio el poder computacional demandante hace que esta técnica no sea ampliamente utilizada.

En las últimas dos décadas, técnicas de aproximación local al problema no lineal han sido propuestas [11, 16]. Estos métodos de filtrado son basados en alguna variante de aproximación de las funciones no lineales [16, 18, 10, 4] o son basados en la transformación unscented [11, 10, 12, 13, 20].

2.3. El filtro de Kalman por ensamble de partículas (EnKF)

El filtro de Kalman por ensamble de partículas fue originalmente desarrollado por [6] como un método de Asimilación de Datos. Inicialmente fue desarrollado enfocado en la aplicación a problemas de estimación de variables climatológicas y geociencias. Campos donde los modelos de estos sistemas son altamente no lineales, multidimensionales con un comportamiento muchas veces caótico. El nombre del filtro es adoptado de los fundamentos teóricos empleados en la predicción del clima: pronósticos por conjunto de muestras y el filtro de Kalman.

2.3.1. Fundamento probabilístico del EnKF

En esta sección las ecuaciones del EnKF son presentadas. Consideremos el siguiente escenario:

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1}) + \mathbf{w}_t \quad (2.59)$$

$$\mathbf{y}_t = \mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t) + \mathbf{v}_t \quad (2.60)$$

donde las distribuciones y parámetros estadísticos de los ruidos del proceso y de las mediciones son:

$$\mathbf{w}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{w}_t : \mathbf{0}, \mathbf{Q}_t) \quad (2.61)$$

$$\mathbf{v}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{v}_t : \mathbf{0}, \mathbf{R}_t) \quad (2.62)$$

$$E[\mathbf{w}_t] = \mathbf{0} \quad , \quad E[\mathbf{v}_t] = \mathbf{0}, \quad (2.63)$$

$$E[\mathbf{w}_t \mathbf{w}_{t+k}^T] = \mathbf{0} \quad , \quad E[\mathbf{w}_t \mathbf{w}_t^T] = \mathbf{Q}_t, \quad (2.64)$$

$$E[\mathbf{v}_t \mathbf{v}_{t+k}^T] = \mathbf{0} \quad , \quad E[\mathbf{v}_t \mathbf{v}_t^T] = \mathbf{R}_t, \quad (2.65)$$

$$E[\mathbf{w}_t \mathbf{v}_{t+k}^T] = \mathbf{0} \quad , \quad E[\mathbf{w}_t \mathbf{v}_t^T] = \mathbf{0} \quad (2.66)$$

con ruidos del tipo blanco, distribuidos de acuerdo a probabilidades Gaussianas con media cero y no correlacionadas $\forall t$ con $k \geq 0$. Las asunciones de ruidos no siempre son realistas en la práctica. Sin embargo, estas asunciones reducen considerablemente la complejidad en la obtención de las ecuaciones del EnKF.

Fase de Pronóstico

El EnKF es un filtro recursivo en el cual el paso de pronóstico en el paso de tiempo t se lleva adelante basado en la información obtenida previamente en la fase de análisis en el instante de tiempo $t - 1$. La metodología del EnKF se fundamenta en la representación de las pdfs tanto predictiva como de filtrado mediante un conjunto muestral, estas representaciones son conocidas como el conjunto de muestras de pronóstico y el conjunto de muestras de análisis.

Consideremos la representación muestral de la pdf a posteriori en el paso de tiempo $t - 1$:

$$p(\mathbf{x}_{t-1} | \mathbf{y}_{1:t-1}) \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{x}_{t-1} - \mathbf{x}_{t-1,i}^a) \quad (2.67)$$

con $\mathbf{X}_{t-1}^a = \{\mathbf{x}_{t-1,i}^a : i = 1, \dots, N\}$ el conjunto muestral de análisis y consideran-

do que la pdf de transición tiene una distribución Gaussiana.

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{x}_{t-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : E[\mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1})], \mathbf{Q}_t), \quad (2.68)$$

entonces, la pdf predictiva es aproximada de la siguiente manera:

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1}) \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : E[\mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1,i}^a)], \mathbf{Q}_t) \quad (2.69)$$

el cual es una suma de un conjunto de pdfs Gaussianas. El conjunto muestral es obtenido a través de la propagación del conjunto muestral de análisis a través del modelo no lineal:

$$\mathbf{x}_{t,i}^f = \mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1,i}^a), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.70)$$

por tanto, es posible calcular la media y la varianza de la pdf predictiva en la ecuación 2.69 por la media y la covarianza muestral:

$$\mathbf{x}_t^f = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_{t,i}^f \quad (2.71)$$

$$\mathbf{P}_t^f = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_{t,i}^f - \mathbf{x}_t^f)(\mathbf{x}_{t,i}^f - \mathbf{x}_t^f)^T \quad (2.72)$$

Un importante hecho con respecto a la representación muestral de la pdf predictiva es la posibilidad de explorar un rango amplio del espacio de estados en contraposición a una exploración local como en el caso del filtro extendido de Kalman. Otra ventaja es la disminución de la carga computacional al momento de evaluar numéricamente Jacobianos en sistemas multidimensionales complejos.

Fase de Análisis

En la fase de análisis, la pdf apriori es actualizada en concordancia con la pdf aposteriori

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t}) = \frac{p(\mathbf{y}_t | \mathbf{x}_t) p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1})}{\int p(\mathbf{y}_t | \mathbf{x}_t) p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1}) d\mathbf{x}_t} \quad (2.73)$$

Utilizando ecuaciones 2.60 y 2.62, la pdf de coincidencia puede ser representada como una distribución Gaussiana de la siguiente manera:

$$p(\mathbf{y}_t | \mathbf{x}_t) = \mathcal{N}(\mathbf{y}_t : E[\mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t)], \mathbf{R}_t) \quad (2.74)$$

De las ecuaciones 2.71 y 2.72, la distribución apriori es una pdf Gaussiana la cual resulta de la suma de N pdfs Gaussianas (ecuación 2.69):

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mathbf{x}_t^f, \mathbf{P}_t^f) \quad (2.75)$$

Entonces, la pdf aposteriori esta dada por:

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t}) = \frac{\mathcal{N}(\mathbf{y}_t : E[\mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t)], \mathbf{R}_t) \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mathbf{x}_t^f, \mathbf{P}_t^f)}{\int \mathcal{N}(\mathbf{y}_t : E[\mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t)], \mathbf{R}_t) \mathcal{N}(\mathbf{x}_t : \mathbf{x}_t^f, \mathbf{P}_t^f) d\mathbf{x}_t} \quad (2.76)$$

En la ecuación 2.76, la presencia de la función no lineal $\mathbf{h}(\cdot)$ puede ser causa para que la expresión no se pueda resolver de forma analítica. En el desarrollo del filtro de Kalman extendido, la linealización de la ecuación de observaciones fue adoptado y por tanto la pdf aposteriori pudo ser aproximada por una distribución Gaussiana. Básicamente, la linealización consiste en el cálculo de la matriz Jacobiana \mathbf{H}_t (ecuación 2.53), matriz evaluada sobre el mejor valor esperado de la trayectoria de los estados, en este caso el mejor valor estimado corresponde a \mathbf{x}_t^f . Siguiendo el mismo desarrollo, la pdf aposteriori se muestra como:

$$p(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_t^a, \mathbf{P}_t^a); \quad (2.77)$$

con

$$\mathbf{K}_t = \mathbf{P}_t^f \mathbf{H}_t^T [\mathbf{H}_t \mathbf{P}_t^f \mathbf{H}_t^T + \mathbf{R}_t]^{-1} \quad (2.78)$$

$$\mathbf{x}_t^a = \mathbf{x}_t^f + \mathbf{K}_t (\mathbf{y}_t - \mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t^f)), \quad (2.79)$$

$$\mathbf{P}_t^a = \mathbf{P}_t^f - \mathbf{K}_t \mathbf{H}_t \mathbf{P}_t^f, \quad (2.80)$$

La metodología hasta ahora desarrollada es completamente válida para sistemas con no-linealidades relativamente bajas. Sin embargo, a diferencia del desarrollo del filtro extendido, un conjunto muestral \mathbf{X}_t^a debe ser generado alrededor del conjunto muestral de pronóstico (ecuación 2.70). Una opción posible para generar el conjunto muestral de análisis puede ser el de lanzar muestras a partir de la pdf a posteriori (ecuación 2.77):

$$\mathbf{x}_{t,i}^a \sim \mathcal{N}(\mathbf{x}_t | \mathbf{y}_{1:t} : \mathbf{x}_t^a, \mathbf{P}_t^a); \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2.81)$$

Una desventaja de este procedimiento podría ser la incorrecta representación del conjunto muestral de análisis debido a la inserción de errores en la obtención de las muestras cuando se generan los valores aleatorios. Otra opción la cual es ampliamente utilizada es la aproximación de la pdf mediante métodos de Monte Carlo. A continuación detallaremos brevemente en que consiste esta metodología. Introducimos la media muestral del sistema de observaciones:

$$\mathbf{y}_t = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{h}_t(\mathbf{x}_{t,i}^f), \quad (2.82)$$

la covarianza cruzada entre los conjuntos muestrales tanto de pronóstico como

del modelo de las observaciones:

$$\mathbf{P}_t^{xy} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_{t,i}^f - \mathbf{x}_t^f)(\mathbf{h}_t(\mathbf{x}_{t,i}^f) - \mathbf{y}_t)^T, \quad (2.83)$$

y la covarianza muestral del conjunto muestral del modelo de las observaciones.

$$\mathbf{P}_t^{yy} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{h}_t(\mathbf{x}_{t,i}^f) - \mathbf{y}_t)(\mathbf{h}_t(\mathbf{x}_{t,i}^f) - \mathbf{y}_t)^T, \quad (2.84)$$

Las expresiones 2.83 y 2.84 permiten una completa obtención de la ganancia de Kalman sin tener que involucrar matrices Jacobianas.

$$\mathbf{K}_t = \mathbf{P}_t^{xy} (\mathbf{P}_t^{yy} + \mathbf{R}_t)^{-1} \quad (2.85)$$

$$\mathbf{P}_t^a = \mathbf{P}_t^f - \mathbf{K}_t (\mathbf{P}_t^{xy})^T \quad (2.86)$$

Una formulación detallada del desarrollo del EnKF es presentada en [8]. Como se puede observar en la ecuación 2.85, el cálculo de la ganancia de Kalman no depende en el cálculo de la matrices Jacobianas. Por tanto, esta es una característica importante del EnKF a la hora de ser implementado. En la práctica ya no es necesario evaluar las covarianzas \mathbf{P}_t^f y \mathbf{P}_t^a en las ecuaciones 2.72 and 2.86. Aún más, al depender únicamente de la ganancia de Kalman de la media y covarianza muestrales entonces es posible considerar diferentes tipos de ruido haciendo más realista la representación de las incertidumbres del modelo, de las entradas, etc.

El método presentado en [3] es considerado en la generación del conjunto muestral de análisis. El método consiste en la generación de pseudoobservaciones subrogadas $\mathbf{Y}_t^s = \mathbf{y}_{t,i}^s; i = 1, \dots, N$ donde $\mathbf{y}_{t,i}$ son muestras aleatorias generadas a partir de la distribución Gaussiana con media \mathbf{y}_t y covarianza \mathbf{R}_t ,

de la siguiente manera:

$$\mathbf{y}_{t,i}^s \sim \mathcal{N}(\mathbf{y}_t : \mathbf{y}_t, \mathbf{R}_t); \quad (2.87)$$

El conjunto muestral de análisis es obtenido a partir del reemplazo de las observaciones por un set de observaciones subrogadas en la ecuación 2.79:

$$\mathbf{x}_{t,i}^a = \mathbf{x}_t^f + \mathbf{K}_t(\mathbf{y}_{t,i}^s - \mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t^f)), \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.88)$$

La ecuación 2.88 indica que todos los miembros del conjunto muestral correspondiente a un estado particular son actualizados por la misma ganancia de Kalman pero con un término de innovación diferente. Para que posibles errores en el muestreo puedan ser considerados en la generación de las observaciones subrogadas, entonces la matriz de covarianza de las observaciones es reemplazada por la covarianza muestral.

$$\mathbf{R}_t^s = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{y}_{t,i}^s - \mathbf{y}_t)(\mathbf{y}_{t,i}^s - \mathbf{y}_t)^T, \quad (2.89)$$

y empleada en el cálculo de la ganancia de Kalman.

Resumen del EnKF

El algoritmo del EnKF es presentado a continuación:

El filtro EnKF es referido en la literatura como un filtro de naturaleza estocástica ya que en la implementación de este filtro se emplean observaciones subrogadas. Una alternativa a esta implementación es la variante Ensemble Square Root Kalman filter [1, 2, 21] en la cual el conjunto muestral es generado basado en el análisis de la media muestral y la matriz de raíces cuadradas de la covarianza del error.

Algorithm 4 Ensemble Kalman Filter

For $t = 1$ to the number of time steps

1. Forecast step:

$$\mathbf{x}_{t,i}^f = \mathbf{f}_{t,t-1}(\mathbf{x}_{t-1,i}^a), \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

$$\mathbf{x}_t^f = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_{t,i}^f$$

$$\mathbf{y}_t = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{h}_t(\mathbf{x}_{t,i}^f),$$

$$\mathbf{P}_t^{xy} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_{t,i}^f - \mathbf{x}_t^f)(\mathbf{h}_t(\mathbf{x}_{t,i}^f) - \mathbf{y}_t)^T,$$

$$\mathbf{P}_t^{yy} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{h}_t(\mathbf{x}_{t,i}^f) - \mathbf{y}_t)(\mathbf{h}_t(\mathbf{x}_{t,i}^f) - \mathbf{y}_t)^T,$$

2. Analysis step:

$$\mathbf{y}_{t,i}^s \sim \mathcal{N}(\mathbf{y}_t : \mathbf{y}_t, \mathbf{R}_t);$$

$$\mathbf{R}_t^s = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{y}_{t,i}^s - \mathbf{y}_t)(\mathbf{y}_{t,i}^s - \mathbf{y}_t)^T,$$

$$\mathbf{K}_t = \mathbf{P}_t^{xy} (\mathbf{P}_t^{yy} + \mathbf{R}_t)^{-1}$$

$$\mathbf{x}_{t,i}^a = \mathbf{x}_t^f + \mathbf{K}_t(\mathbf{y}_{t,i}^s - \mathbf{h}_t(\mathbf{x}_t^f)), \quad i = 1, \dots, N.$$

Capítulo 3

3. Modelaje e implementación de los filtros

3.1. Modelaje del Reactor químico

El propilenglicol (nombre sistemático: propano-1,2-diol) es un compuesto orgánico (un alcohol, más precisamente un diol) incoloro, insípido e inodoro. Es un líquido aceitoso claro, higroscópico y miscible con agua, acetona, y cloroformo. Se obtiene por la hidratación del óxido de propileno. Óxido de propileno y el agua reacciona a presión atmosférica en un Reactor de agitación continua (CSTR). La reacción es exotérmica, por lo que circula un líquido refrigerante dentro de la camisa del reactor para mantener su temperatura.

En el presente trabajo, tanto el modelo como los filtros son implementados empleando el software MATLAB. Las entradas consideradas en este estudio son: el caudal de enfriamiento, el caudal de alimentación y el caudal del producto. Un análisis en detalle del desarrollo del mo-

Tabla 3.1: Variables de entrada del CSTR.

Entradas	Estado estable
Coolant flow rate (F_j)	$9,937 \times 10^{-3} \frac{m^3}{s}$
Product flow rate (F)	$2,72 \times 10^{-3} \frac{m^3}{s}$
Feed flow rate (F_o)	$2,65 \times 10^{-3} \frac{m^3}{s}$

delo se lo puede encontrar en [15]. Las ecuaciones involucradas en el desarrollo del modelo se presentan a continuación:

$$\dot{V}_r = \frac{\rho_o F_o}{\rho} - F \quad (3.1)$$

$$\dot{C}_a = \frac{F_o}{V_r} (C_{ao} - C_a) - C_a k_0 e^{-E/RT_r} \quad (3.2)$$

$$\dot{T}_r = \frac{F_o}{V_r} (T_0 - T_r) - \frac{\lambda C_a k_0 e^{-E/RT_r}}{\rho C_p} - \frac{U A_j (T_r - T_j)}{V_r \rho C_p} \quad (3.3)$$

$$\dot{T}_j = \frac{F_j}{V_j} (T_{cin} - T_j) + \frac{U A_j (T_r - T_j)}{V_j \rho_j C_j} \quad (3.4)$$

Los datos operativos de estado estacionario para esto proceso se presentan a continuación, las entradas al proceso y sus respectivos valores en estado estable están dados en la Tabla 3.1. Los parámetros y sus valores en estado estable en la Tabla 3.2. Las variables y sus valores de estado estable en la Tabla 3.3. Finalmente las variables de salida del CSTR corresponden a los mismos estados y se presentan en la Tabla 3.4.

3.2. CSTR representado en espacio de estados

A continuación se presenta la representación del CSTR en espacio de estados. Las variables consideradas de entrada se presentan en

Tabla 3.2: Valores de los parámetros del CSTR.

Parámetros	Estado estable
Feed concentration (C_{ao})	$7,128 \text{ kmol m}^{-3}$
Feed temperature (T_o)	$296,89 \text{ K}$
Inlet coolant temperature (T_{cin})	288 k
Jacket volume (V_j)	$0,4467 \text{ m}^3$
Heat transfer term (UA)	$1 \times 10^5 \text{ W/K}$
Reaction rate constant (k_o)	$1,696 \times 10^{13} \text{ 1/s}$
Activation energy term (E/R)	$9,0645 \times 10^3 \text{ k}$
Heat of reaction (λ)	$-9 \times 10^7 \text{ J/kmol}$
Feed density (ρ^0)	$936,7 \times \text{kg/m}^3$
Product density (ρ)	$912,9 \text{ kg/m}^3$
Coolant density (ρ_j)	1008 kg/m^3
Heat capacity of product (C_p)	3368 J/kgK
Heat capacity of coolant (C_j)	4203 J/kgK

Tabla 3.3: Variables del CSTR.

Variable del Proceso	Estado estable
Reactor volume (V_r)	$6,739 \text{ m}^3$
Product Concentration (C_a)	$0,3684 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$
Reactor Temperature (T_r)	333 K
Outlet coolant temperature (T_j)	$319,76 \text{ k}$

Tabla 3.4: Variables de salida del CSTR.

Salidas del Proceso	Estado estable
Reactor volume (V_r)	$6,739 \text{ m}^3$
Product Concentration (C_a)	$0,3684 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$
Reactor Temperature (T_r)	333 K
Outlet coolant temperature (T_j)	$319,76 \text{ k}$

Tabla 3.5: Entradas en espacio de estados.

Entradas	Espacio de Estados
Coolant flow rate (F_j)	U_{Fj}
Product flow rate (F)	U_f
Feed flow rate (F_o)	U_{Fo}

Tabla 3.6: Variables del CSTR.

Variable del Proceso	Espacio de Estados
Product Concentration (C_a)	x_1
Reactor Temperature (T_r)	x_2
Outlet coolant temperature (T_j)	x_3
Reactor volume (V_r)	x_4

la Tabla 3.5. Las variables de estado se presentan en la Tabla 3.6.

Las salidas en la tabla 3.7.

De esta manera el vector de estados queda definido por 3.5.

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

El vector de entradas está definido en 3.6.

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} U_{Fj} & U_f & U_{Fo} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Tabla 3.7: Variables de salida del CSTR.

Salidas del Proceso	Espacio de Estados
Product Concentration (C_a)	y_1
Reactor Temperature (T_r)	y_2
Outlet coolant temperature (T_j)	y_3
Reactor volume (V_r)	y_4

El vector de salidas está definido por 3.7.

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

El sistema en espacio de estados es representado de la siguiente manera. Primero, la ecuación de estados sería:

$$\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}, \mathbf{U}) \quad (3.8)$$

Donde $f(\cdot)$ es la función no lineal que define el comportamiento dinámico. Vamos ahora a expresar el comportamiento dinámico del CSTR, indicado en el sistemas de ecuaciones 3.4, en espacios de estados:

$$\dot{x}_1 = \frac{U_{Fo}}{x_4}(C_{ao} - x_1) - x_1 k_0 e^{-E/Rx_2} \quad (3.9)$$

$$\dot{x}_2 = \frac{U_{Fo}}{x_4}(T_0 - x_2) - \frac{\lambda x_1 k_0 e^{-E/Rx_2}}{\rho C_p} - \frac{UA_j(x_2 - x_3)}{x_4 \rho C_p} \quad (3.10)$$

$$\dot{x}_3 = \frac{U_{Fj}}{V_j}(T_{cin} - x_3) + \frac{UA_j(x_2 - x_3)}{V_j \rho_j C_j} \quad (3.11)$$

$$\dot{x}_4 = \frac{\rho_o U_{Fo}}{\rho} - U_f \quad (3.12)$$

La ecuación de las observaciones/mediciones se la representa de la siguiente manera:

$$\mathbf{y} = C\mathbf{x} \quad (3.13)$$

En nuestro caso de estudio los estados coinciden directamente con

las salidas del CSTR por tanto la ecuación de las observaciones/mediciones es lineal y se la presenta a continuación:

$$y = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{x} \quad (3.14)$$

3.3. Discretización del modelo del CSTR

En esta sección procederemos a discretizar el modelo del CSTR presentado en la sección 3.2. Discretizar es el proceso de transformar el modelo en tiempo continuo a tiempo discreto para ello emplearemos la letra k como el índice de tiempo discreto (paso de tiempo). Empleando el método de Euler obtenemos el modelo del CSTR en tiempo discreto.

$$\begin{aligned} x_{1_{k+1}} &= x_{1_k} + \left(\frac{U_{Fo}}{x_{4_k}} (C_{ao} - x_{1_k}) - x_{1_k} k_0 e^{-E/Rx_{2_k}} \right) \Delta T \\ x_{2_{k+1}} &= x_{2_k} + \left(\frac{U_{Fo}}{x_{4_k}} (T_0 - x_{2_k}) - \frac{\lambda x_{1_k} k_0 e^{-E/Rx_{2_k}}}{\rho C_p} - \frac{U A_j (x_{2_k} - x_{3_k})}{x_{4_k} \rho C_p} \right) \Delta T \\ x_{3_{k+1}} &= x_{3_k} + \left(\frac{U_{Fj}}{V_j} (T_{cin} - x_{3_k}) + \frac{U A_j (x_{2_k} - x_{3_k})}{V_j \rho_j C_j} \right) \Delta T \\ x_{4_{k+1}} &= x_{4_k} + \left(\frac{\rho_o U_{Fo}}{\rho} - U_f \right) \Delta T \end{aligned} \quad (3.15)$$

donde ΔT es el paso de tiempo el cual debe ser suficientemente pequeño como para que el error de simulación sea bajo. La discretización permite implementar el modelo en un software de programación y así poder simular el comportamiento del CSTR. En nuestro caso

emplearemos el model CSTR discretizado en el software MATLAB.

3.4. Simulación del CSTR en MATLAB script

En esta sección se presenta la simulación del modelo discreto del CSTR (ecuación 3.15) en el software MATLAB script. A continuación presentamos el código en MATLAB.

```
% truth states generation
for t=1:Nsteps-1
    xtrue(1,t+1)=xtrue(1,t)+...
        (((Uf0/xtrue(4,t))*(Ca0-xtrue(1,t))) - ...
        (xtrue(1,t)*k0*exp(-E_R/xtrue(2,t))))*deltaT;
    xtrue(2,t+1)=xtrue(2,t)+...
        (((Uf0/xtrue(4,t))*(T0-xtrue(2,t))) - ...
        ((lambda*xtrue(1,t)*k0*exp(-E_R/xtrue(2,t)))/(rho*Cp)) - ...
        ((UAj*(xtrue(2,t)-xtrue(3,t)))/(xtrue(4,t)*rho*Cp)))*deltaT;
    xtrue(3,t+1)=xtrue(3,t)+...
        (((Ufj/Vj)*(Tcin-xtrue(3,t)))+...
        ((UAj*(xtrue(2,t)-xtrue(3,t)))/(Vj*rhoj*Cj)))*deltaT;
    xtrue(4,t+1)=xtrue(4,t)+(((rho0*Uf0)/rho)-Uf)*deltaT;
end
```

En primera instancia procedemos a diseñar las señales de entrada al CSTR. La figura 3.1 muestra la señal de entrada flujo del enfriante. Se ha procedido a diseñar el comportamiento de la señal considerando cambios repentinos con respecto al valor de estado estable. La variación de la señal permitirá evaluar el desempeño de los filtros en condiciones dinámicas.

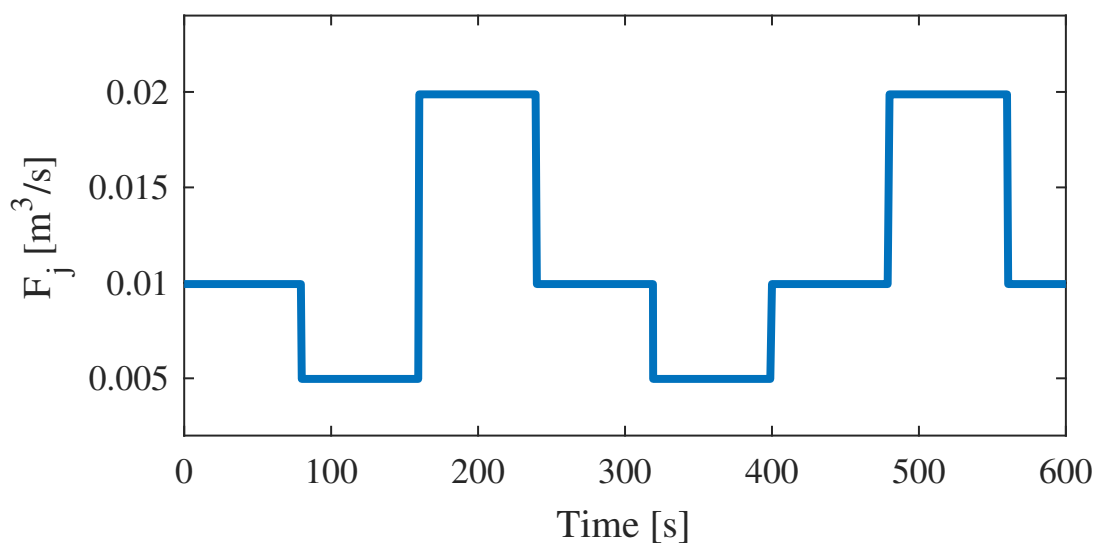


Figura 3.1: Gráfica de la variable de entrada Coolant Flow Rate

La figura 3.2 muestra la señal de entrada flujo del producto. Se ha procedido a diseñar el comportamiento de la señal considerando cambios repentinos con respecto al valor de estado estable. La variación de la señal permitirá evaluar el desempeño de los filtros en condiciones dinámicas.

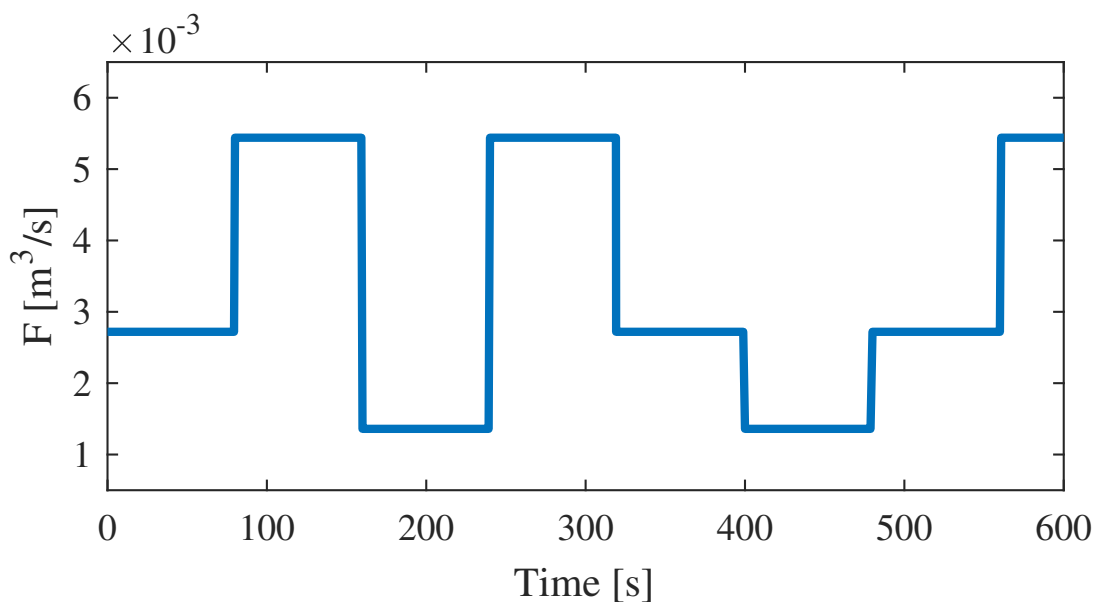


Figura 3.2: Gráfica de la variable de entrada Product Flow Rate

La figura 3.3 muestra la señal de entrada flujo de alimentación. Se ha procedido a diseñar el comportamiento de la señal considerando cambios repentinos con respecto al valor de estado estable. La variación de la señal permitirá evaluar el desempeño de los filtros en condiciones dinámicas.

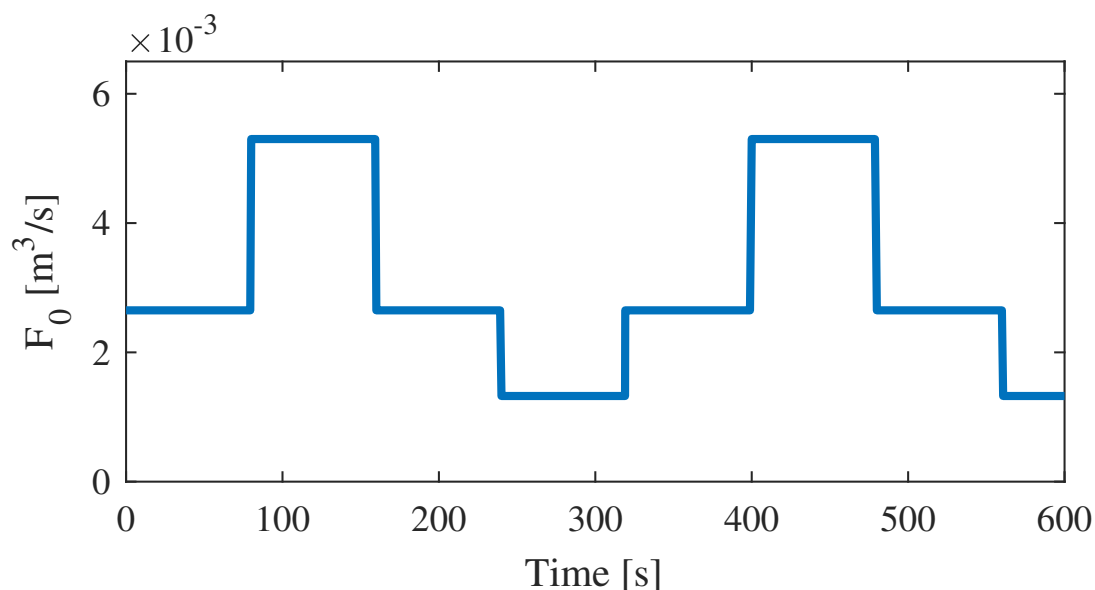


Figura 3.3: Gráfica de la variable de entrada Feed Flow Rate

Luego de correr las simulaciones con las entradas presentadas anteriormente, procedemos a mostrar el comportamiento de las variables de estado del CSTR. Se han considerado condiciones iniciales dadas en la tabla 3.3. El tiempo simulación que se ha considerado de acuerdo a la dinámica de respuesta de las variables de estado y es de 600 segundos. La gráfica 3.8 muestra el comportamiento dinámico de la variable de estado Concentración del Producto C_a . Se logra apreciar la dinámica rápida de esta variable y la relación relevante con la señal de entrada Flujo de Alimentación.

La gráfica 3.9 muestra el comportamiento dinámico de la variable de

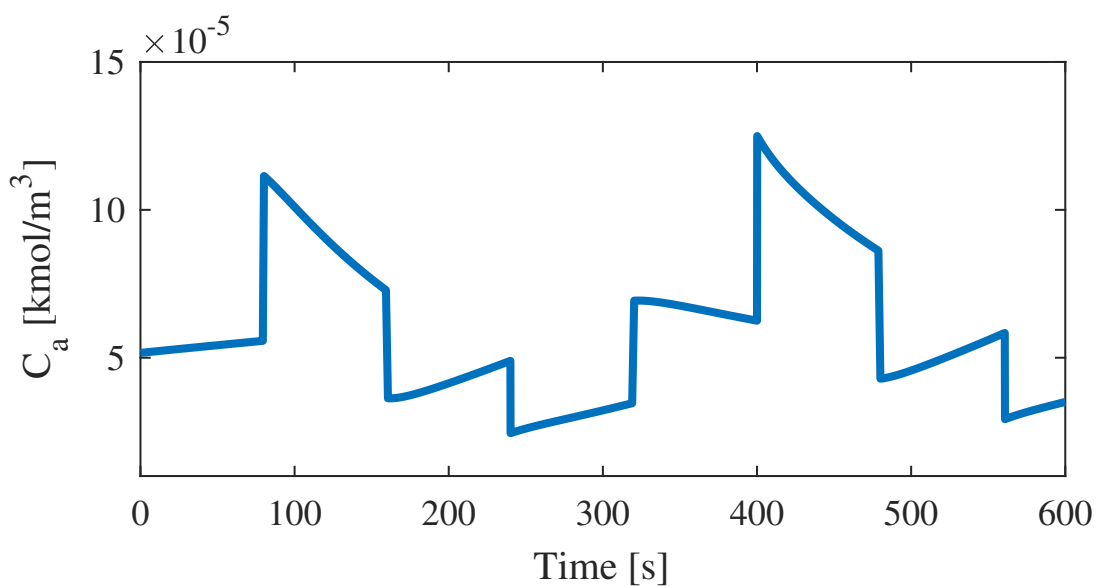


Figura 3.4: Gráfica del estado Product Concentration

estado Temperatura del Reactor T_r .

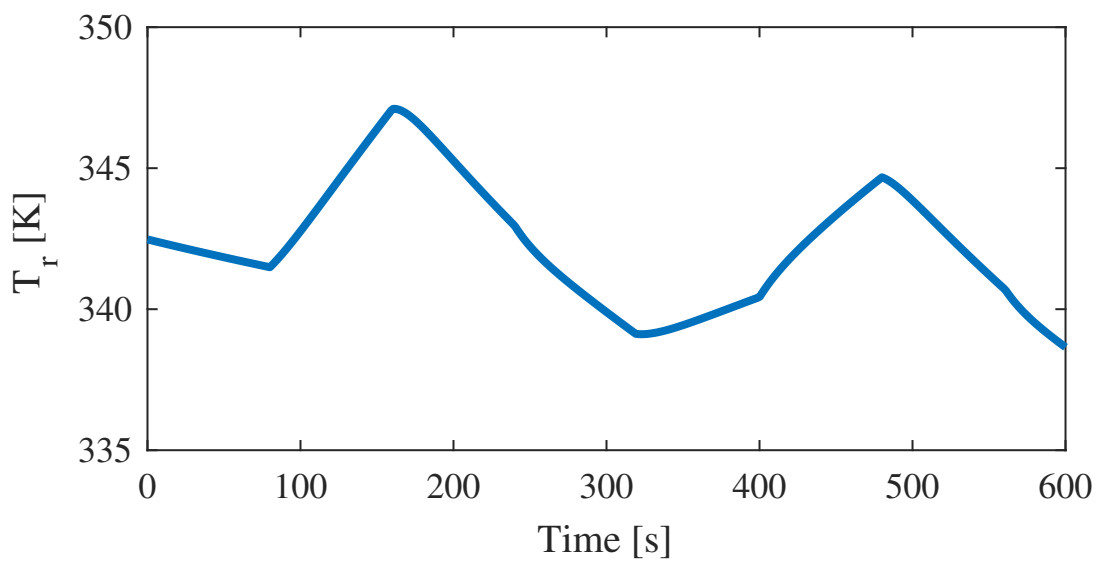


Figura 3.5: Gráfica del estado Reactor Temperature

La gráfica 3.10 muestra el comportamiento dinámico de la variable de estado Temperatura de enfriamiento T_j .

La gráfica 3.7 muestra el comportamiento dinámico de la variable de estado Concentración del Producto V_r .

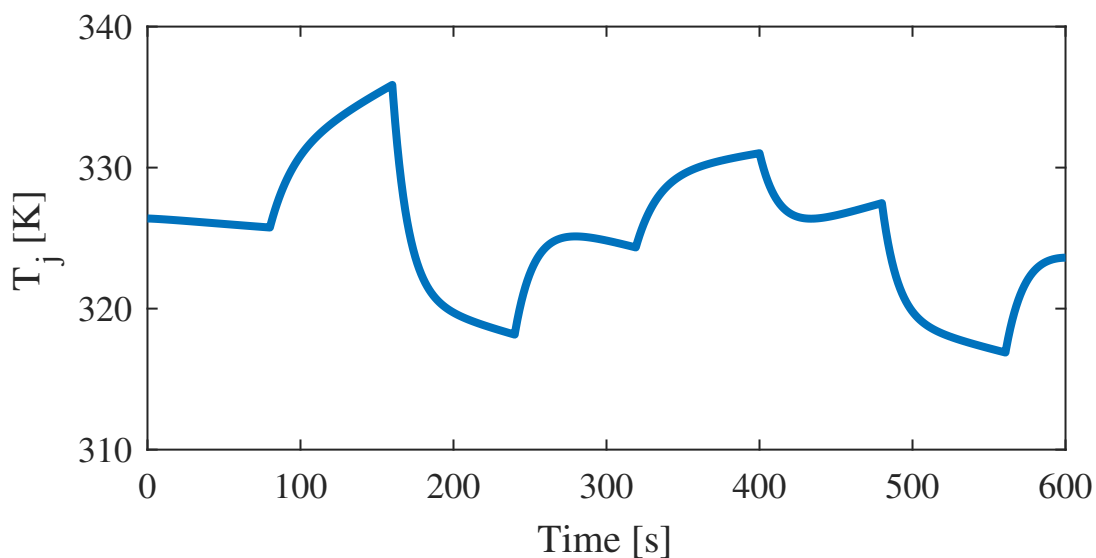


Figura 3.6: Gráfica del estado Outlet Coolant Temperature

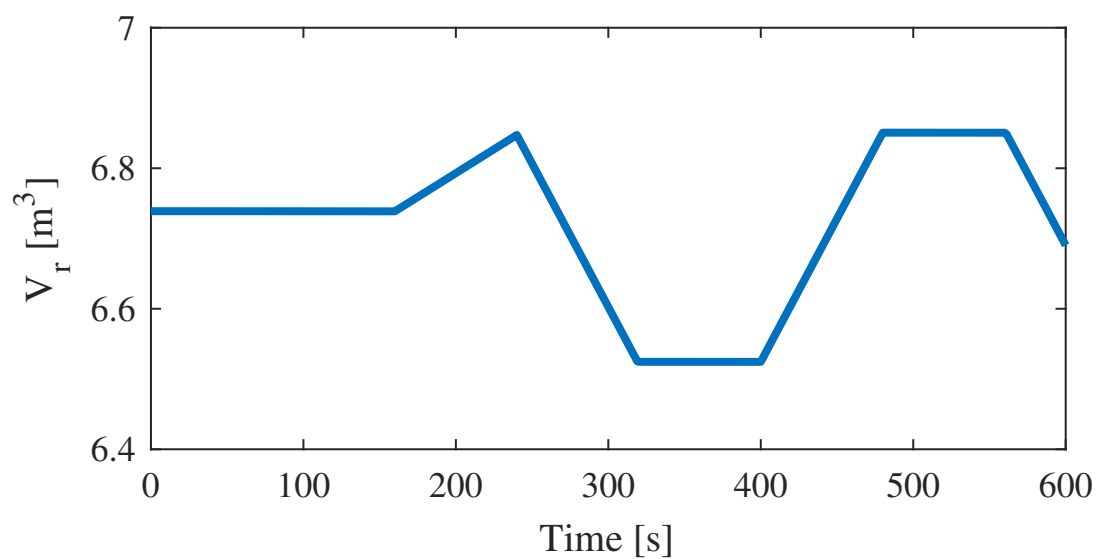


Figura 3.7: Gráfica del estado Reactor Volume

3.4.1. Generación de las mediciones empleadas en el estudio

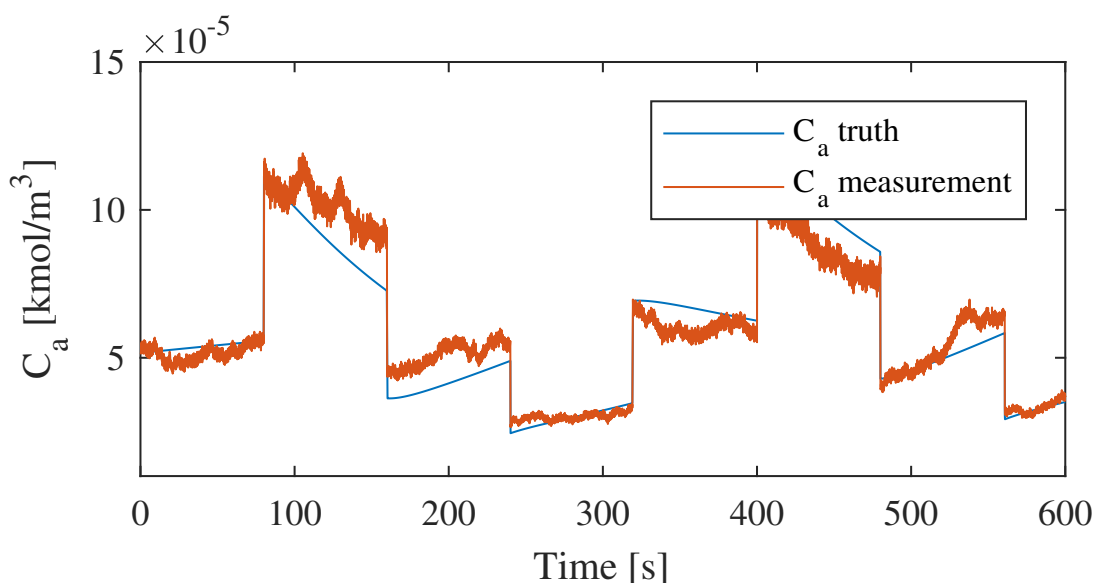
Para llevar adelante la fase de experimentación en este estudio es necesario contar con mediciones de las variables de estado para

Tabla 3.8: Variables de salida del CSTR.

Elementos del proceso	porcentaje de ruido
Parámetros	0,1 %
Estados	7×10^{-3} %
Salidas	5×10^{-2} %

poder estimarlas. Un experimento sintético permite generar pseudo-mediciones considerando ruidos del tipo blanco sumativos en las entradas, estados y parámetros de nuestro modelo del CSTR. Las entradas y salidas afectados por ruidos representan ruidos de instrumentación. En este mismo sentido los errores de modelado son representados con ruidos aditivos respecto a los parámetros y estados del sistema. La tabla 3.8 presenta las varianzas de los ruidos empleados en la generación de las mediciones.

A continuación presentamos las gráficas de las mediciones generadas para cada uno de los estados y que las estaremos empleando para validar el funcionamiento de los filtros.

**Figura 3.8:** Gráfica del estado Product Concentration

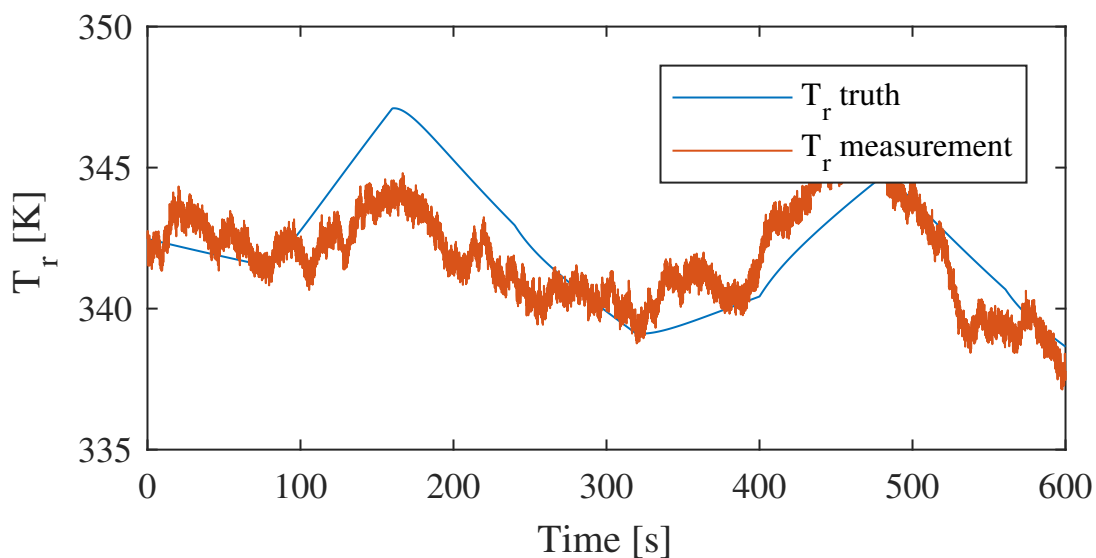


Figura 3.9: Gráfica del estado Reactor Temperature

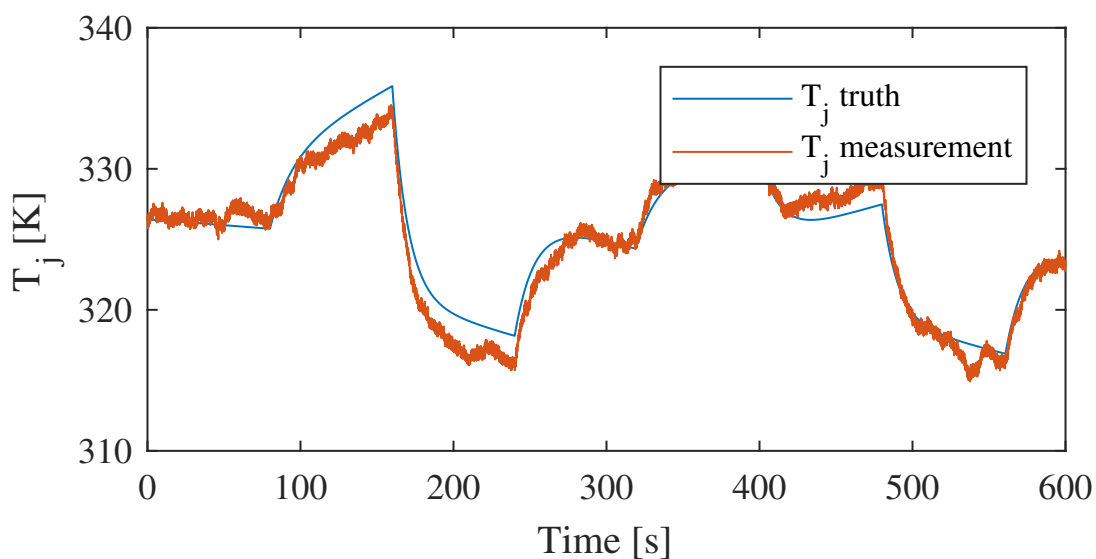


Figura 3.10: Gráfica del estado Outlet Coolant Temperature

Como podemos apreciar en las gráficas, las pseudo-mediciones son las señales que se emplearán en la evaluación de desempeño de los filtros estudiados en este trabajo. En el caso de sistemas lineales los filtros deberían reproducir el comportamiento de los valores base(truth) de los estados.

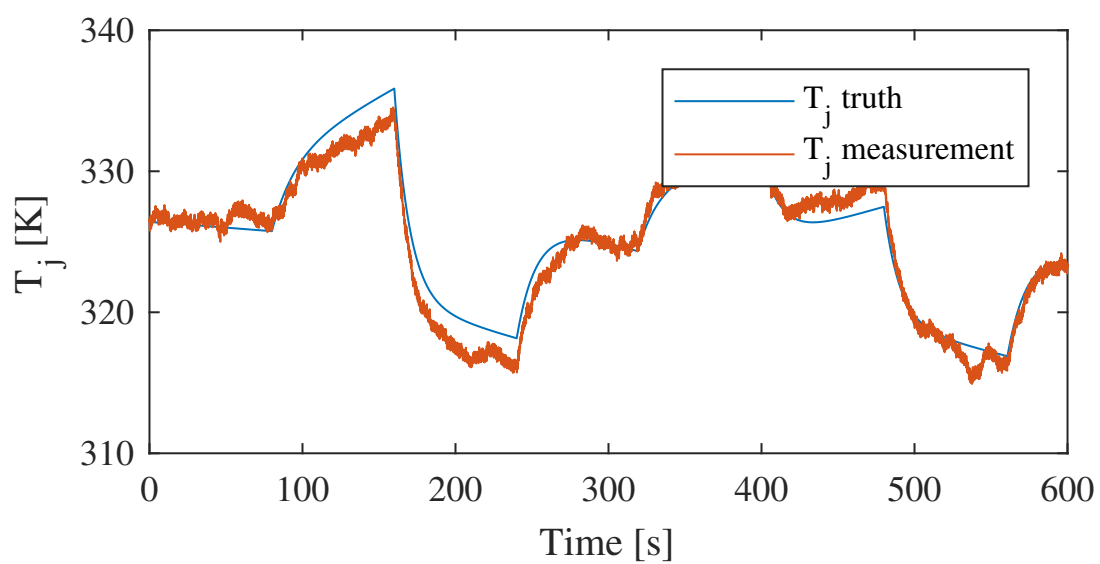


Figura 3.11: Gráfica del estado Reactor Volume

Capítulo 4

4. Analisis Comparativo del desempeño de los filtros

En el presente capítulo se desarrollan las metodologías empleadas en el estudio del problema de estimación en un CSTR produciendo propylene-glycol. Inicialmente presentaremos los detalles de la implementación del filtro extendido de Kalman para luego explicar la aplicación del Ensemble Kalman Filter. Finalmente, ambas técnicas serán evaluadas y su desempeño comparado.

4.1. Implementación del Filtro Extendido de Kalman

En la primera fase de implementación del filtro deberemos encontrar las matrices Jacobianas A, B, C . A continuación presentamos las referidas matrices directamente en el código implementado en

MATLAB. Inicialmente mostramos la implementación de cada una de las derivadas parciales involucradas en la evaluación del Jacobiano para la matriz A .

```
% Matrix definitions

% Transition matrix A
A11 = 1+(-(Uf0/x(4,t))-(k0*exp(-E_R/x(2,t))))*deltaT;
A12 = ((-E_R*x(1,t)*k0*exp(-E_R/x(2,t)))/(x(2,t))^2)*deltaT;
A13 = 0;
A14 = ((-Uf0*(Ca0-x(1,t)))/(x(4,t))^2)*deltaT;
A21 = ((-lambda*k0*exp(-E_R/x(2,t)))/(rho*Cp))*deltaT;
A22 = 1+((-Uf0/x(4,t))-((lambda*x(1,t)*k0*exp(-E_R/x(2,t))...
    *E_R)/(rho*Cp*((x(2,t))^2)))-(UAj/(x(4,t)*rho*Cp))*deltaT;
A23 = (UAj/(x(4,t)*rho*Cp))*deltaT;
A24 = ((-Uf0*(T0-x(2,t)))/((x(4,t))^2)+(UAj*(x(2,t)-x(3,t)))/...
    (((x(4,t))^2)*rho*Cp))*deltaT;
A31 = 0;
A32 = (UAj/(Vj*rhoj*Cj))*deltaT;
A33 = 1+((-Ufj/Vj)-(UAj/(Vj*rhoj*Cj)))*deltaT;
A34 = 0;
A41 = 0;
A42 = 0;
A43 = 0;
A44 = 1;

A = [A11 A12 A13 A14;
     A21 A22 A23 A24;
     A31 A32 A33 A34;
     A41 A42 A43 A44];
```

La matriz B es una matriz Jacobiana que relaciona los estados del CSTR con las entradas. Cada uno de los términos se los encuentra

a partir de la expresión de las derivadas parciales. A continuación se muestra la matriz B :

```
%B matrix
B11 = 0;
B12 = 0;
B13 = ((Ca0-x(1,t))/x(4,t))*deltaT;
B21 = 0;
B22 = 0;
B23 = ((T0-x(2,t))/x(4,t))*deltaT;
B31 = 0;
B32 = ((Tcin-x(3,t))/Vj)*deltaT;
B33 = 0;
B41 = (-1)*deltaT;
B42 = 0;
B43 = (rho0/rho)*deltaT;

B = [B11 B12 B13;
     B21 B22 B23;
     B31 B32 B33;
     B41 B42 B43];
```

La matriz C es la matriz que relaciona la salida del sistema CSTR con los estados del sistema. La matriz C fue previamente desarrollada en la ecuación 3.14

Como fue detallado en la sección anterior, el filtro de Kalman consta de dos fase: la fase de pronóstico en la cual el nuevo valor del vector de estados es calculado x_{k+1} a través del modelo. La siguiente fase corresponde a la fase de análisis. En esta fase es importante contar con las mediciones, en este caso mediciones de cada uno de los estados. A continuación se presenta la implementación del algoritmo del filtro extendido de Kalman.

```

%—prediction step———
%   %obtain apriori states
x(1,t+1)=x(1,t)+(((Uf0/x(4,t))*(Ca0-x(1,t)))-...
      (x(1,t)*k0*exp(-E_R/x(2,t))))*deltaT;
x(2,t+1)=x(2,t)+(((Uf0/x(4,t))*(T0-x(2,t)))-((lambda*x(1,t)*k0*...
      exp(-E_R/x(2,t)))/(rho*Cp))-((UAj*(x(2,t)-x(3,t)))/...
      (x(4,t)*rho*Cp)))*deltaT;
x(3,t+1)=x(3,t)+(((Ufj/Vj)*(Tcin-x(3,t)))+(UAj*(x(2,t)-...
      x(3,t)))/(Vj*rhoj*Cj))*deltaT;
x(4,t+1)=x(4,t)+(((rho0*Uf0)/rho)-Uf)*deltaT;
%   x(:,t+1) = A*x(:,t) + B*[Uf Ufj Uf0]';
Pk=A*Pk*A'+Q;
%%—update state———
Kalman = (Pk*Ck')/(Ck*Pk*Ck'+R);
x(:,t+1) = x(:,t+1) + Kalman*(ym(:,t+1)-Ck*x(:,t+1));
Pk=(Id-(Kalman*Ck))*Pk;

```

A continuación se presentan los resultados del filtro extendido de Kalman para cada uno de los estados. Podemos apreciar en la figura 4.1 que la variabilidad en el comportamiento de la variable de estado C_a es tan extrema que todo el rango espacial de la figura se ve copado por el color rojo. La razón por la que sucede este evento es debido a la corrección del valor de los estados a través de la ganancia de Kalman. Ganancia que finalmente experimenta cambios significativos. En el caso de la figura 4.2 observamos un desempeño apropiado del filtro en el seguimiento de la dinámica del estado Temperatura del Reactor. En el caso de la figura 4.3 observamos un desempeño apropiado del filtro en el seguimiento de la dinámica del estado Temperatura del refrigerante.

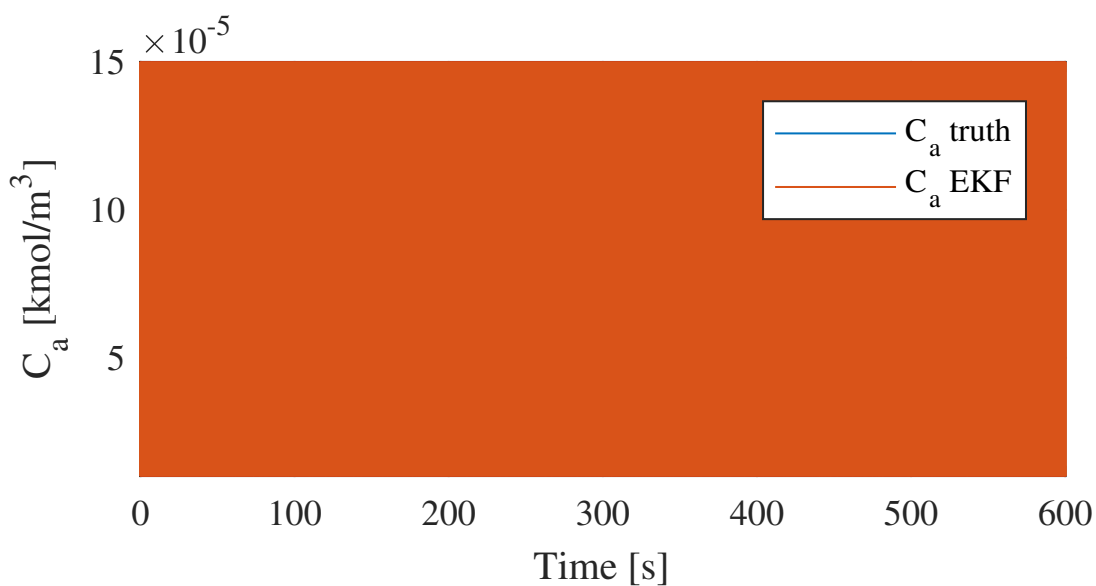


Figura 4.1: Estimación EKF del estado Product Concentration

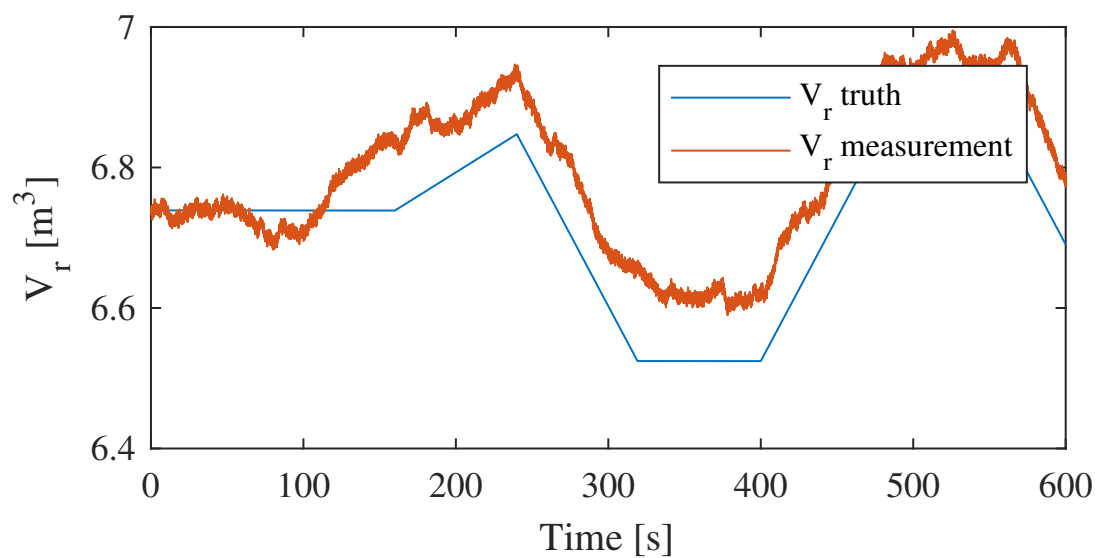


Figura 4.2: Estimación EKF del estado Reactor Temperature

En el caso de la figura 4.4 observamos un desempeño apropiado del filtro en el seguimiento de la dinámica del estado Volumen del Reactor.

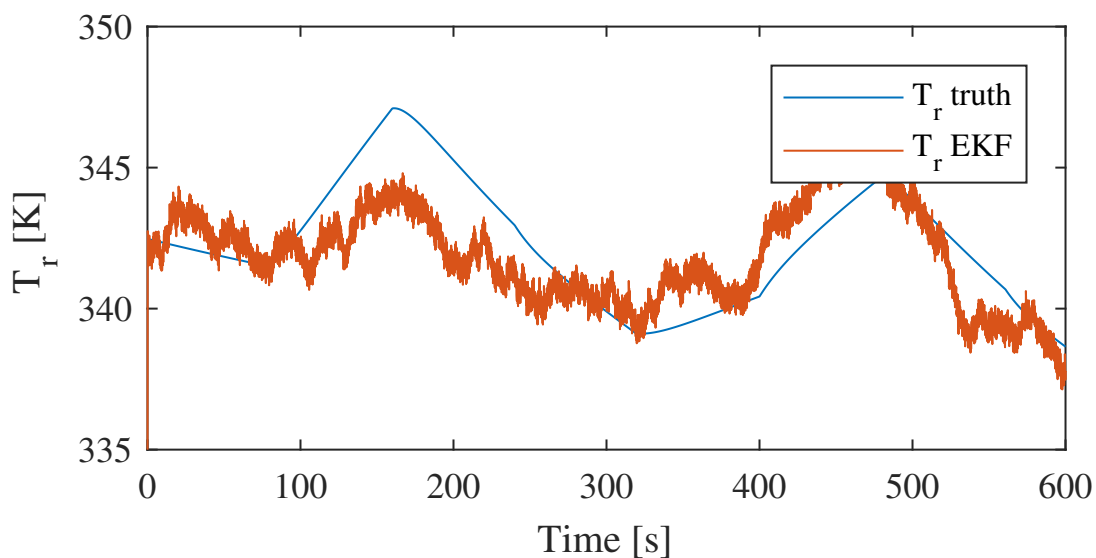


Figura 4.3: Estimación EKF del estado Outlet Coolant Temperature

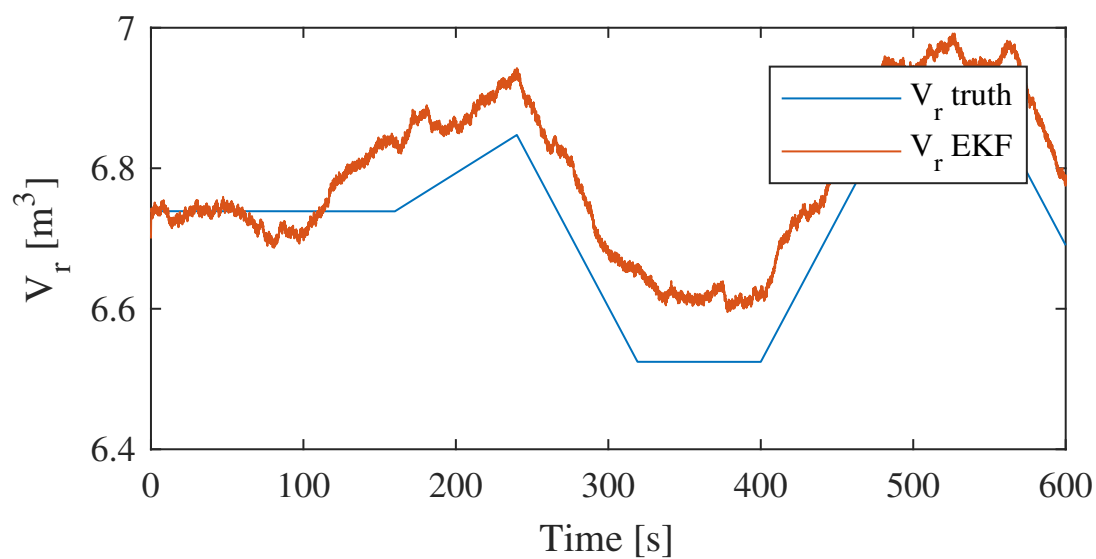


Figura 4.4: Estimación EKF del estado Reactor Volume

4.2. Implementación del Ensemble Kalman Filter

El Ensemble Kalman Filter es un filtro en el cual no es necesario encontrar las matrices Jacobianas. A continuación presentamos el desarrollo del filtro implementado en el ambiente de MATLAB. Inicial-

mente mostramos la perturbación de los parámetros y los estados en la generación del conjunto muestral.

```

for i=1:Nensem
    %Model parameters with noise
    Ca0=7.128+(nparens*7.128*randn);    %feed concentration
    T0=296.89+(nparens*296.89*randn);    %feed temperature
    Tcin=288+(nparens*288*randn);    %inlet coolant temperature
    Vj=0.4467+(nparens*0.4467*randn);    %jacket volume
    Cp=3368+(nparens*3368*randn);    %heat capacity of product
    UAj=1e+5+(nparens*1e+5*randn);    %heat transfer term
    k0=1.696e+13+(nparens*1.696e+13*randn) ; %reaction rate constant
    E_R=9.0645e+3+(nparens*9.0645e+3*randn); %activation energy term
    lambda=-9e+7+(nparens*9e+7*randn); %heat of reaction
    rho0=936.7+(nparens*936.7*randn);    %food density
    rho=912.9+(nparens*912.9*randn);    %product density
    rhoj=1008+(nparens*1008*randn);    %coolant density
    Cj=4203+(nparens*4203*randn);    %heat capacity of coolant
    %NONLINEAR MODEL
    xe1(t+1,i) = xe1(t,i)+(((Uf0/xe4(t,i))*(Ca0-xe1(t,i))) - ...
        (xe1(t,i)*k0*exp(-E_R/xe2(t,i))))*deltaT;
    xe1(t+1,i) = xe1(t+1,i)+(nstate*xe1(t+1,i))*randn;
    xe2(t+1,i) = xe2(t,i)+(((Uf0/xe4(t,i))*(T0-xe2(t,i))) - ...
        ((lambda*xe1(t,i)*k0 * ...
        exp(-E_R/xe2(t,i)))/(rho*Cp)) - ((UAj*(xe2(t,i)-xe3(t,i)))/...
        (xe4(t,i)*rho*Cp)))*deltaT;
    xe2(t+1,i) = xe2(t+1,i)+(nstate*xe2(t+1,i))*randn;
    xe3(t+1,i) = xe3(t,i)+(((Ufj/Vj)*(Tcin-xe3(t,i)))+(UAj*(xe2(t,i)...
        -xe3(t,i)))/(Vj*rhoj*Cj))*deltaT;
    xe3(t+1,i) = xe3(t+1,i)+(nstate*xe3(t+1,i))*randn;
    xe4(t+1,i) = xe4(t,i)+(((rho0*Uf0)/rho)-Uf)*deltaT;
    xe4(t+1,i) = xe4(t+1,i)+(nstate*xe4(t+1,i))*randn;

```

Sin embargo para poder aproximar estas matrices se emplean métodos de Monte Carlo, específicamente se trabaja con la media y la covarianza muestral. Para lo cual deberemos generar muestras a partir de la perturbación de las entradas, parámetros y estados. La fase de pronóstico consiste en generar muestras a partir del modelo con diferentes realizaciones de los parámetros y los estados.

```
xens = [xe1(t+1,:);
        xe2(t+1,:);
        xe3(t+1,:);
        xe4(t+1,:)];
tempPP = mean(xens,2);
tempP = tempPP*ones(1,Nensem);
tempP = tempP - xens; %>= ensemble state error
Y_vec_i = xens;
tempPPy = mean(Y_vec_i,2);
tempPy = Y_vec_i - tempPPy; %>= observation error
P_ini = (1/(Nensem-1))*(tempP*tempP');
%P_ini = [varS1_obs 0; 0 varS2_obs];
Pxy_ini = (1/(Nensem-1))*(tempP*tempPy');
Pyy_ini = (1/(Nensem-1))*(tempPy*tempPy');
noise_y = (0 + sqrt(nmeas)*randn(4,Nensem));
Y_vec = ym(:,t) + noise_y; %ones(1,npar);
%K_gain = (P_ini*H_mat')/(H_mat*P_ini*H_mat'+R_mat);
K_gain = Pxy_ini/(Pyy_ini + Rens);
xens = xens + K_gain*(Y_vec_i - Y_vec);
XMIN(:,t+1) = min(xens(1,:));
XENS(:,t+1) = mean(xens,2);
XMAX(:,t+1) = max(xens(1,:));
```

La fase de análisis corresponde a la corrección de cada miembro del

conjunto muestral con la misma ganancia Kalman encontrada. Esto se puede verificar en la implementación.

El resultado del desempeño del filtro Ensemble Kalman es mostrado en las siguientes figuras.

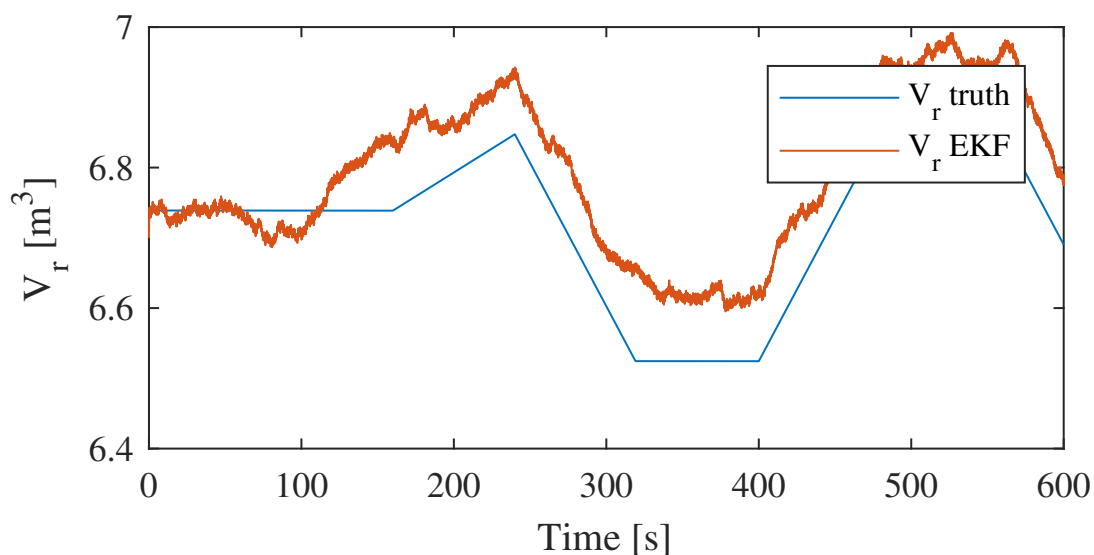


Figura 4.5: Estimación EnKF del estado Product Concentration

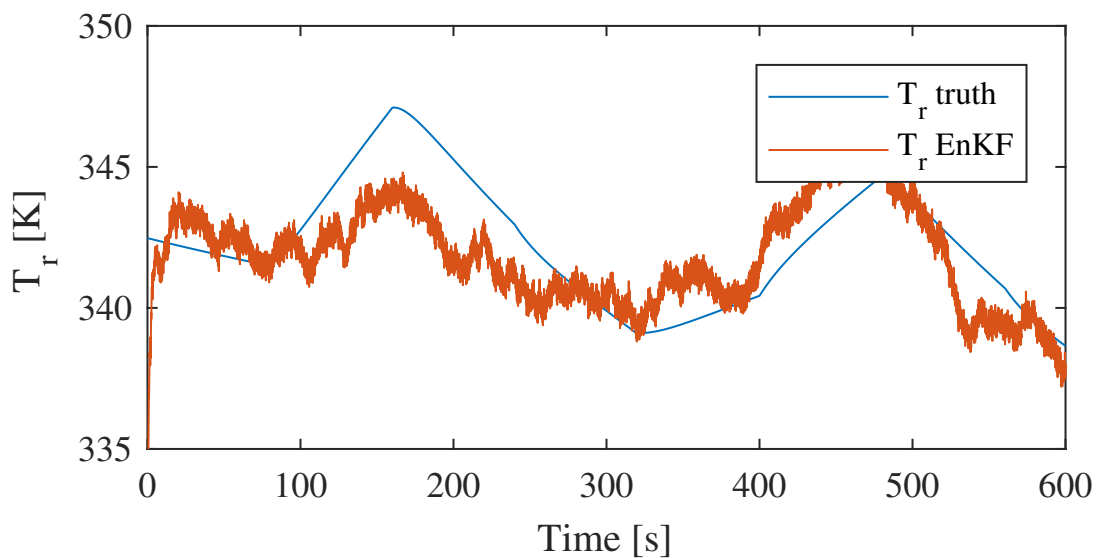


Figura 4.6: Estimación EnKF del estado Reactor Temperature

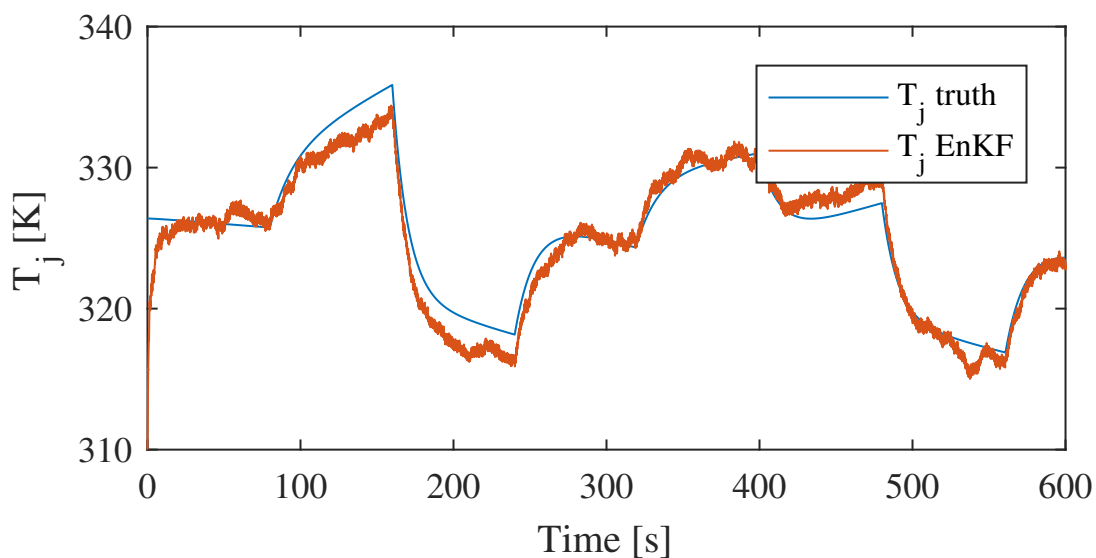


Figura 4.7: Estimación EnKF del estado Outlet Coolant Temperature

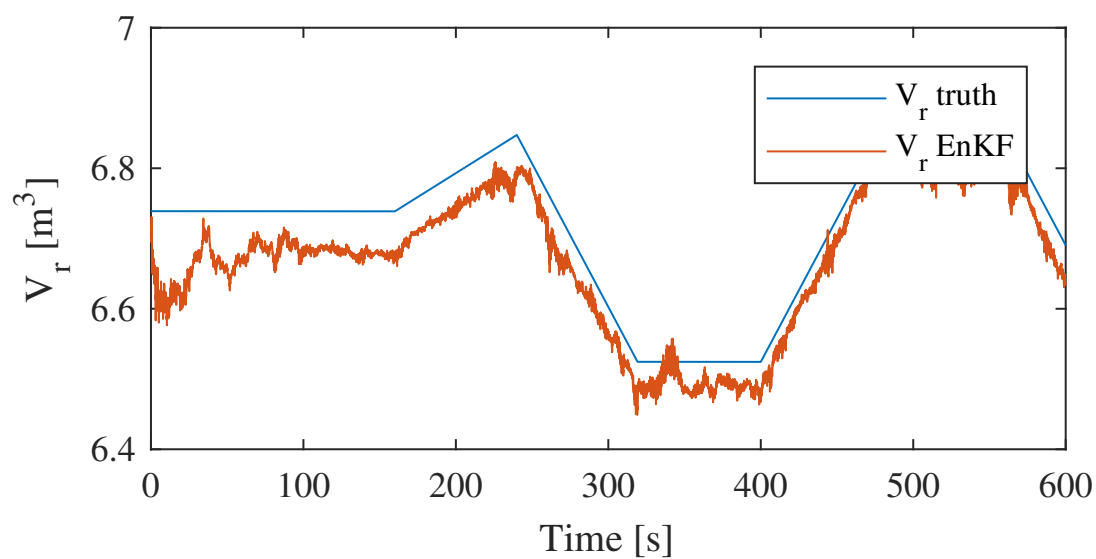


Figura 4.8: Estimación EnKF del estado Reactor Volume

4.3. Análisis Comparativo

En esta sección se presenta el análisis comparativo de ambos filtros. Las siguientes gráficas muestran el desempeño en la estimación de los estados del CSTR.

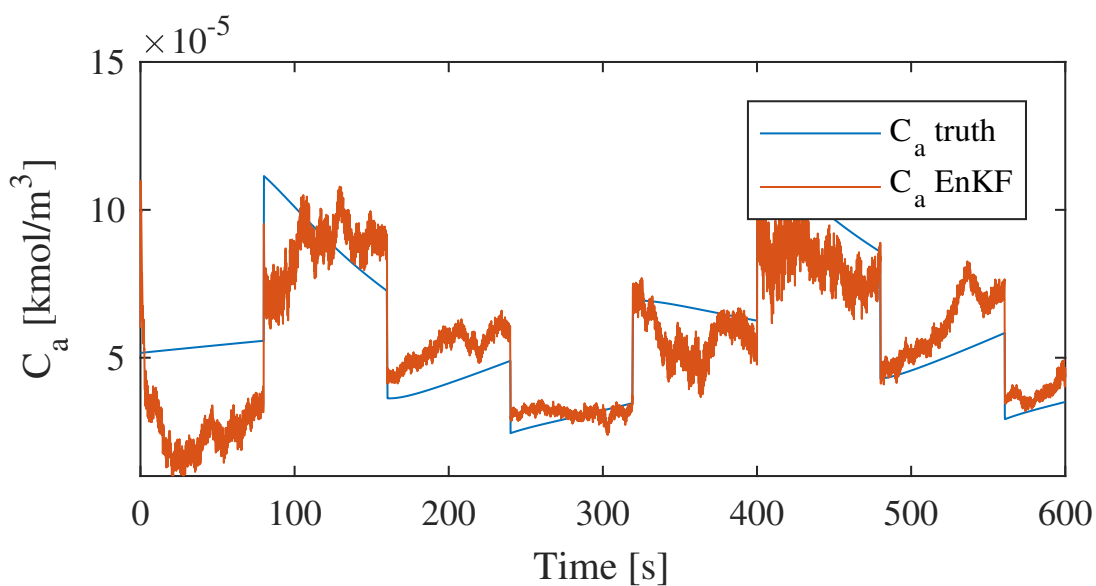


Figura 4.9: Estimación tanto EnKF como EKF del estado Product Concentration

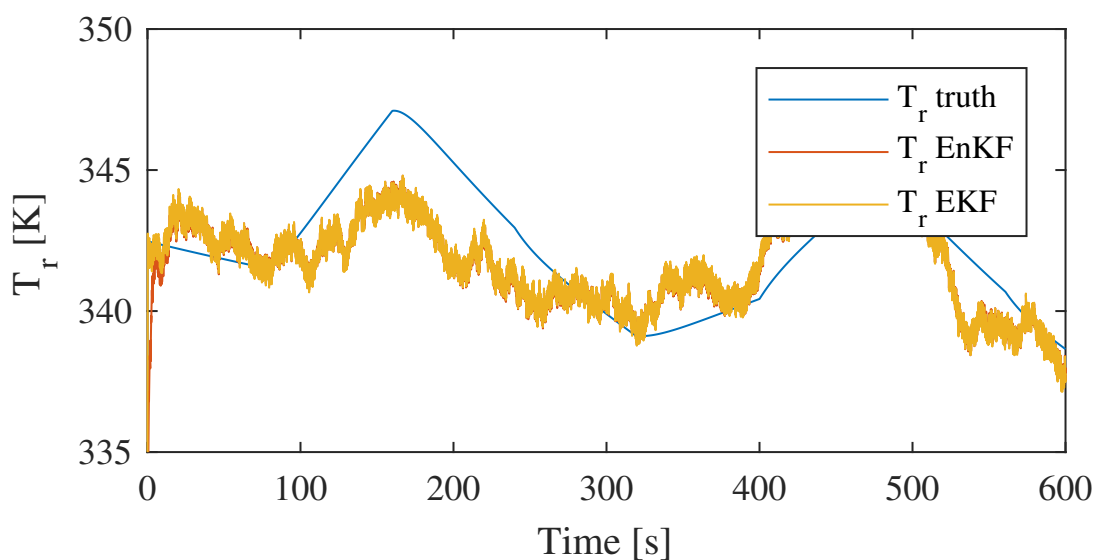


Figura 4.10: Estimación tanto por EnKF como EKF del estado Reactor Temperature

Un indicador cuantitativo del desempeño de funcionamiento de los filtros es la raíz de la media del error cuadrático (RMSE de sus siglas en inglés). Procedemos a mostrar el índice RMSE para cada uno de los estados y cada uno de los filtros en la tabla 4.1.

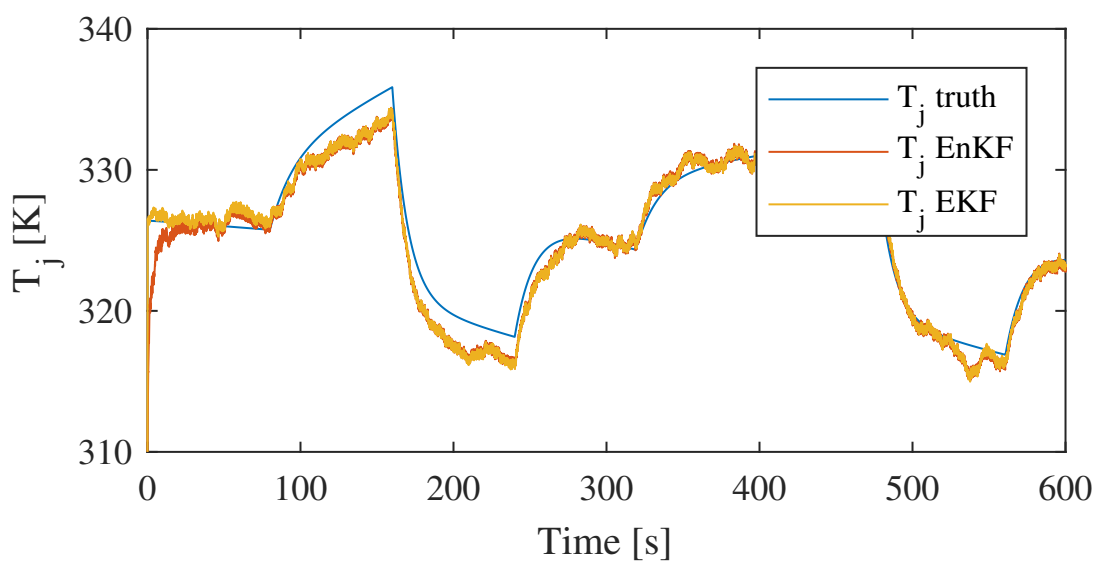


Figura 4.11: Estimación tanto del EnKF como el EKF del estado Outlet Coolant Temperature

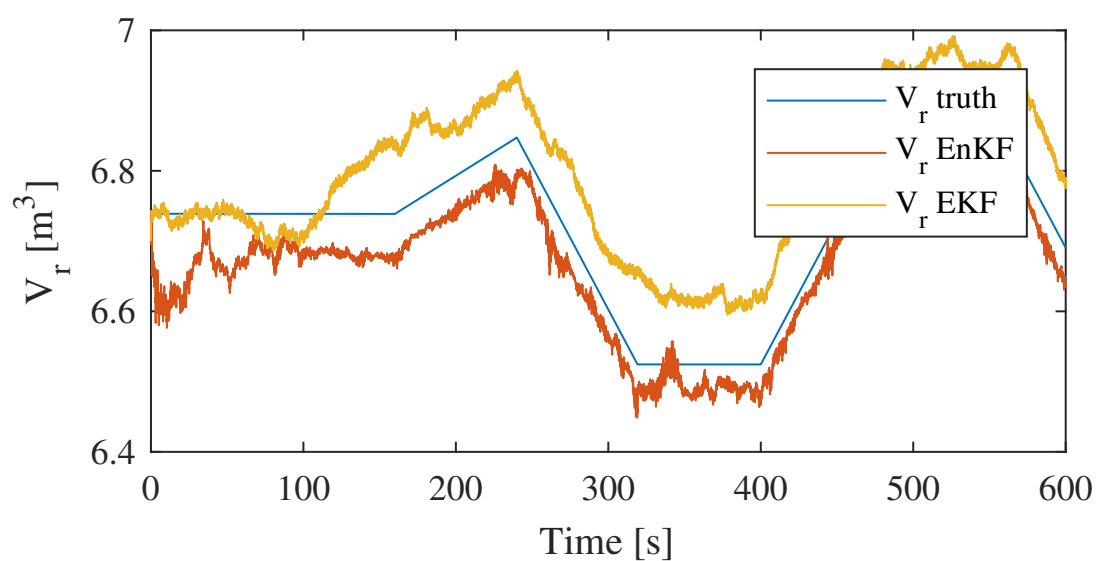


Figura 4.12: Estimación tanto del EnKF como el EKF del estado Reactor Volume

Tabla 4.1: Variables del CSTR.

Estado	RMSE EKF	RMSE EnKF
Product Concentration (C_a)	$4,3 \times 10^{-3} kmol/m^3$	$1,7 \times 10^{-5} kmol/m^3$
Reactor Temperature (T_r)	1,6584K	1,6963K
Outlet coolant temperature (T_j)	1,2186k	1,3678k
Reactor volume (V_r)	0,0853m ³	0,0521m ³

Conclusiones

CONCLUSIONES

- 1) Se discretizó e implementó en Matlab el modelo complejo y no lineal de un reactor de agitación continua mediante un método numérico. El modelo es la base de nuestro estudio ya que a partir del modelo se generaron las mediciones empleadas en la evaluación de los filtros.
- 2) Los métodos EKF y EnKF se implementaron como estimadores de estados mostrando un desempeño apropiado al reconstruir los valores verdaderos de los estados. El filtro EnKF mostró un mejor desempeño respecto al EKF, reconstruyendo de manera más precisa los estados del sistema.
- 3) La principal ventaja del EnKF en este estudio es su mejor precisión sin embargo, al ser una metodología basada en muestras entonces es mayor el tiempo de cómputo que demanda respecto al EKF. Se recomienda como estudio futuro el análisis del número de muestras óptimo y el tiempo de cómputo asociado.

Bibliografía

- [1] JL Anderson. An ensemble adjustment Kalman filter for data assimilation. *MONTHLY WEATHER REVIEW*, 129(12):2884–2903, 2001.
- [2] C. H. Bishop, BJ Etherton, and SJ Majumdar. Adaptive sampling with the ensemble transform Kalman filter. Part I: Theoretical aspects. *MONTHLY WEATHER REVIEW*, 129(3):420–436, 2001.
- [3] Gerrit Burgers, P. J. van Leeuwen, and G. Evensen. On the Analysis Scheme in the Ensemble Kalman Filter. *Mon. Weather Rev.*, 126:1719–1724, 1998.
- [4] J.L. Crassidis. Sigma-point kalman filtering for integrated gps and inertial navigation. *Aerospace and Electronic Systems, IEEE Transactions on*, 42(2):750–756, april 2006.
- [5] D. Dochain, F. Couenne, and C. Jallut. Enthalpy based modelling and design of asymptotic observers for chemical reactors. *International Journal of Control*, 82(8):1389–1403, 2009.
- [6] Geir Evensen. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics. *J. Geophys. Res*, 99(C5):10143–10162, 1994.

- [7] N.J. Gordon, D.J. Salmond, and A.F.M. Smith. Novel approach to nonlinear/non-Gaussian Bayesian state estimation. *Radar and Signal Processing, IEE Proceedings F*, 140(2):107 –113, 1993.
- [8] PL Houtekamer and HL Mitchell. A sequential ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation. *Mon. Weather Rev.*, 129(1):123–137, 2001.
- [9] Rui Huang, Sachin C. Patwardhan, and Lorenz T. Biegler. Stability of a class of discrete-time nonlinear recursive observers. *Journal of Process Control*, 20(10):1150 – 1160, 2010.
- [10] K. Ito and K. Xiong. Gaussian filters for nonlinear filtering problems. *Automatic Control, IEEE Transactions on*, 45(5):910 –927, may 2000.
- [11] S. Julier, J. Uhlmann, and H.F. Durrant-Whyte. A new method for the nonlinear transformation of means and covariances in filters and estimators. *Automatic Control, IEEE Transactions on*, 45(3):477 – 482, mar 2000.
- [12] S.J. Julier. The scaled unscented transformation. In *American Control Conference, 2002. Proceedings of the 2002*, volume 6, pages 4555 – 4559 vol.6, 2002.
- [13] S.J. Julier and J.K. Uhlmann. Unscented filtering and nonlinear estimation. *Proceedings of the IEEE*, 92(3):401 – 422, mar 2004.
- [14] Rudolph Emil Kalman. A new approach to linear filtering and prediction problems. *J. Basic Eng-T ASME*, 82(Series D):35–45, 1960.
- [15] W.L. Luyben. *Chemical Reactor Design and Control*. Wiley, 2007.

- [16] Magnus Norgaard, Niels K. Poulsen, and Ole Ravn. New developments in state estimation for nonlinear systems. *Automatica*, 36(11):1627 – 1638, 2000.
- [17] Shahin Salehi and Mohammad Shahrokhi. Two observer-based nonlinear control approaches for temperature control of a class of continuous stirred tank reactors. *Chemical Engineering Science*, 63(2):395 – 403, 2008.
- [18] Tor Steinar Schei. A finite-difference method for linearization in nonlinear estimation algorithms. *Automatica*, 33(11):2053–2058, nov 1997.
- [19] Dan Simon. *Optimal State Estimation: Kalman, H Infinity, and Nonlinear Approaches*. Wiley-Interscience, 1st edition, jun 2006.
- [20] Miroslav Šimandl, Jakub Královec, and Torsten Söderström. Advanced point-mass method for nonlinear state estimation. *Automatica*, 42(7):1133–1145, July 2006.
- [21] JS Whitaker and TM Hamill. Ensemble data assimilation without perturbed observations. *MONTHLY WEATHER REVIEW*, 130(7):1913–1924, JUL 2002.