

Sensor Network Design based on the Observability and Precision Degree

Leandro P. Rodriguez, María N. Pantano, Gustavo J. Scaglia, Mabel C. Sánchez

Abstract—The Unscented Kalman Filter is a state estimation method used in nonlinear dynamic systems to estimate the mean and covariance of a random variable undergoing a nonlinear transformation, knowing the process model and the measurements. Therefore, an adequate choice of the measured variables improves the performance of the filter technique. In this context, the sensor network design problem allows selecting a set of variables that minimizes the global estimation error when the instrumentation budget is limited. This is solved using a level traversal tree search algorithm, whose computation time is reduced by evaluating the design criteria sequentially. In this work, it is proposed to address the effect of the circumstantial loss of measurements on the system observability and the estimates precision. The success of the sensor network design methodology is demonstrated for the copolymerization process of Methyl Methacrylate and Vinyl Acetate, widely studied in the literature.

Index Terms—Copolymerization Process, Level Traversal Search, Observability and Precision degree, Sensor Network Design, Unscented Kalman Filter.

I. INTRODUCCIÓN

El Filtro de Kalman Unscented (UKF) es una de las técnicas preferidas para inferir variables de estado en sistemas dinámicos no lineales utilizando un modelo del proceso basado en primeros principios y un conjunto de mediciones [1,2]. Normalmente, las plantas de procesos químicos tienen numerosas variables que pueden ser medidas, sin embargo, medir todas ellas no es económica ni físicamente factible [3]. Usualmente, los sensores son colocados de acuerdo a la experiencia previa o al juicio del ingeniero, pero esto puede causar un desconocimiento parcial o total de la evolución de las variables de estados llevando a un desempeño subóptimo del proceso [4].

Además, la pérdida circunstancial de mediciones puede llevar a que el sistema no sea observable, y por consiguiente, la calidad de las estimaciones decaiga notablemente. Sin embargo, una adecuada selección de las variables medidas puede mejorar significativamente el desempeño del UKF aún cuando uno o más sensores no estén temporalmente disponibles [5]. A este procedimiento se lo conoce como problema de Diseño de Redes de Sensores (DRS), y consiste en elegir el conjunto de variables que van a ser medidas y las características de los sensores [6]. La mayoría de las estrategias de DRS desarrolladas hasta el momento se han enfocado en el diagnóstico de fallas y monitoreo de procesos en estado estacionario [7-11]. Con respecto al desarrollo de estrategias de DRS para monitoreo de sistemas dinámicos lineales se formularon dos problemas de DRS que usan el Filtro de Kalman lineal como técnica de estimación de estados [12]. En el primero se minimizó una medida del Error Global de Estimación (EGE) sujeto a restricciones de costo, mientras que en el segundo se minimizó el costo de la RS sujeto a restricciones de error de estimación.

Sin embargo, la formulación de estas técnicas para sistemas dinámicos no lineales (SDNL) no ha recibido la misma atención. En este contexto, se presentó una metodología para determinar la localización óptima de una red de sensores basada en la observabilidad del sistema [13,14]. El procedimiento consiste en calcular el Gramiano Empírico de Observabilidad (GEO), el cual se obtiene a través de simulación o con mediciones del proceso sobre una región de operación. La principal ventaja de esta forma de cálculo con respecto a otras es que no requiere la linealización del modelo matemático, lo que lo hace computacionalmente tratable. Además, los autores argumentaron que un SDNL con un alto índice de observabilidad proporciona estimaciones más precisas. Esto no siempre es verdad, ya que un sistema con un alto índice de observabilidad y redundancia pero con mediciones poco precisas, podría proporcionar errores de estimación altos cuando se utiliza una técnica de filtrado como el UKF, los cuales pueden aumentar en presencia de pérdida de mediciones [5,15].

Con respecto al DRS para procesos monitoreados con UKF, se desarrolló una estrategia de diseño que maximiza la precisión de las estimaciones sujetas a restricciones de costo, confiabilidad y redundancia [15]. La precisión se calcula teniendo en cuenta que todos los instrumentos de medición funcionan, sin embargo el valor obtenido puede no ser el óptimo para las nuevas configuraciones de sensores resultantes bajo el escenario de la pérdida circunstancial de mediciones. Además, la incorporación del criterio de confiabilidad depende de la

L. Rodriguez, Instituto de Ingeniería Química, Universidad Nacional de San Juan (UNSJ), CONICET, Av. Lib. San Martín Oeste 1109, San Juan J5400ARL, Argentina. (e-mail: lrodri@unsj.edu.ar).

N. Pantano, Instituto de Ingeniería Química, Universidad Nacional de San Juan (UNSJ), CONICET, Av. Lib. San Martín Oeste 1109, San Juan J5400ARL, Argentina. (e-mail: npantano@unsj.edu.ar).

G. Scaglia, Instituto de Ingeniería Química, Universidad Nacional de San Juan (UNSJ), CONICET, Av. Lib. San Martín Oeste 1109, San Juan J5400ARL, Argentina. (e-mail: gscaglia@gmail.com).

M. Sánchez, Planta Piloto de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Camino La Carrindanga km. 7, Bahía Blanca, Argentina. (e-mail: msanchez@plapiqui.edu.ar).

probabilidad de falla de los instrumentos, el cual suele ser un dato impreciso.

Más tarde, se formuló un problema de DRS que maximiza simultáneamente la eficiencia del sistema y la precisión de las estimaciones para un sistema de control basado en estimadores UKF [16]. En la función objetivo se utilizó un vector de peso para asignar preferencias subjetivas a los errores de estimación de las variables medidas. La selección de los componentes del vector de peso no es una tarea trivial. Dependiendo del juicio del diseñador, se pueden obtener procesos más eficientes o mejores estimaciones.

Recientemente, se presentó una estrategia de DRS de mínimo costo para un proceso químico controlado que utiliza el UKF como estrategia de estimación de estados [5]. En contraste con los trabajos [15,16] se implementó un procedimiento para el cálculo del límite superior de la restricción de EGE basado en el cálculo de la traza del GEO [13], sin embargo tampoco se contempló el efecto de la pérdida temporal de mediciones sobre el error de estimación.

La literatura muestra que se ha prestado poca atención a la formulación de problemas de DRSs que contemplen la pérdida circunstancial de mediciones y su efecto sobre la observabilidad del sistema y la precisión de las estimaciones para procesos que son monitoreados con UKF [15-16]. Además, los problemas de optimización presentados han sido resueltos utilizando algoritmos evolutivos, los cuales no garantizan que la solución encontrada sea la óptima [15,16].

En este trabajo se presenta una nueva estrategia de DRS para SDNL que son monitoreados con UKF. La misma aborda la pérdida temporal de mediciones y el efecto que esto ocasiona sobre la observabilidad del sistema y el EGE. El EGE se minimiza sujeto a restricciones sobre el presupuesto de instrumentación de la planta y la observabilidad del sistema. Para contemplar el escenario de falla en los sensores se define el Grado de Observabilidad y Precisión (GOP) y se formulan los índices de desempeño asociados a estas dos propiedades del sistema. En la Tabla 1 se muestran las principales diferencias de la metodología propuesta con respecto a las existentes.

TABLA I
METODOLOGÍAS DE DISEÑO DE REDES DE SENSORES

	Enfoque				Propuesta
	[5]	[13]	[15]	[16]	
Observabilidad	Si	Si	Si	No	Si
Error de Estimación	Si	No	Si	Si	Si
GOP	No	No	No	No	Si
Solución Óptima	Si	No	No	No	Si

Este artículo está organizado de la siguiente forma: en la siguiente sección se presentan los criterios de observabilidad y de error de estimación de un SDNL. Luego se define en la sección III el GOP de un sistema y se reformulan dichos criterios. En la sección IV se presenta la formulación del problema de DRS y se describe el algoritmo de búsqueda utilizado para su resolución. En la sección de Resultados, se muestran las soluciones obtenidas para el problema de DRS de un proceso de Copolimerización de Metacrilato de Metilo (MM) y Acetato de Vinilo (AV) para distintos presupuestos. Las conclusiones se reportan al final de este manuscrito.

II. PRECISIÓN EN SISTEMAS DINÁMICOS NO LINEALES

Consideremos la representación matemática general de un SDNL como el que se muestra a continuación:

$$\mathbf{x}_{t+1} = \chi(\mathbf{x}_t, \mathbf{u}_t) + \mathbf{w}_t \quad (1)$$

donde la función $\chi(\cdot)$ es el modelo del proceso, $\mathbf{x}_t \in R^J$ es el vector de estados del sistema, $\mathbf{u}_t \in R^S$ el vector de entradas de control y perturbaciones y $\mathbf{w}_t \in N(\mathbf{0}, \mathbf{Q}_t)$ es el vector de ruido del proceso en el intervalo de tiempo t , siendo \mathbf{Q}_t la matriz de covarianza de los ruidos del proceso.

Para un RS dada, la cual se representa a través del vector de variables binarias $\mathbf{q} \in R^I$, donde $q_i = 1$ si la i -ésima variable es medida, y $q_i = 0$ si no lo es, el vector de mediciones en el intervalo $(t+1)$ es:

$$\mathbf{y}_{t+1}(\mathbf{q}) = \mathbf{Y}\mathbf{q}(\mathbf{x}_{t+1}, \mathbf{u}_{t+1}) + \mathbf{v}_{t+1}(\mathbf{q}) \quad (2)$$

donde la función $\mathbf{Y}\mathbf{q}(\cdot)$ es el modelo de las mediciones y el vector $\mathbf{v}_{t+1}(\mathbf{q}) \in N(\mathbf{0}, \mathbf{R}_{t+1}(\mathbf{q}))$ representa el ruido de las mediciones, siendo $\mathbf{R}_t(\mathbf{q})$ una matriz diagonal. La dimensión del vector $\mathbf{y}_{t+1}(\mathbf{q})$ es igual a $\sum_{i=1}^I q_i = \alpha$, donde $\alpha \leq I$, e I es la dimensión del conjunto Φ , el cual contiene todas las posibles mediciones del sistema. La función $\mathbf{Y}\mathbf{q}(\cdot)$ puede involucrar algunas o todas las variables \mathbf{x} y \mathbf{u} .

Ejemplo 1: Dado el conjunto Φ que contiene las variables: $\{y_1, y_2, y_3, y_4, y_5\}$, y el vector $\mathbf{q} = [1 \ 0 \ 1 \ 1 \ 0]^T$, las variables medidas son: y_1, y_3 e y_4 , como se puede ver en la Figura 1.

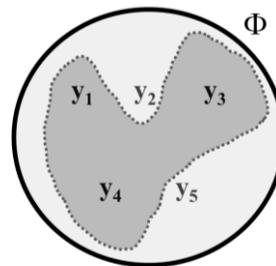


Fig. 1. Variables medidas.

Observación 1: Cuando $\alpha = I$, la función $\mathbf{Y}\mathbf{q}(\cdot)$ es la función $\mathbf{Y}(\cdot)$, e $\mathbf{y}_t(\mathbf{q}) = \mathbf{y}_t$.

Uno de los métodos más utilizados para verificar la observabilidad en SDNL es el método de las derivadas de Lie. Sin embargo, su cómputo es engorroso para procesos químicos modernos debido a la complejidad de su cálculo, el cual aumenta con el tamaño del sistema. Con el propósito de salvar este inconveniente, se presentó una técnica que determina dicha observabilidad en el intervalo de operación $(t=1; \dots; T)$ mediante el cálculo del rango del GEO [13]. Este procedimiento es más rápido y eficiente que el método de Lie y computacionalmente tratable para sistemas de un tamaño considerable.

Primero, se calcula el GEO para la i -ésima variable medida Ξ_i , con $i = \{1; \dots; I\}$. Cada elemento del GEO se determina a partir de datos de simulación, recopilados dentro de una región operativa del proceso. Para esto, se requieren las trayectorias de salida y_i para $t = \{1; \dots; T\}$ obtenidas a través de ensayos de simulación o a partir de datos experimentales. Luego, el GEO para una RS dada se calcula como:

$$\Xi = \sum_{i=1}^I q_i \Xi_i \quad (3)$$

Cabe destacar que la información contenida en dicha matriz representa un promedio de la Observabilidad en dicha región de operación. Luego, $\beta_1(\mathbf{q}) = \text{rango}(\Xi)$ y el SDNL es Observable si:

$$\beta_1(\mathbf{q}) = J \quad (4)$$

donde J es la dimensión del vector \mathbf{x}_t .

En el trabajo [14], los autores expresaron que existe una relación entre la observabilidad, la redundancia de las mediciones y la precisión de las estimaciones en SDNL. Para un sistema observable, la precisión aumenta con el aumento de la redundancia. Esta relación es solamente estructural, y no tiene en cuenta el método de estimación utilizado ni la precisión de los sensores.

La técnica UKF es una de las técnicas de estimación de estados para procesos químicos representados a través de SDNL, como el descrito en las ecuaciones (1-2), que ha recibido mayor atención en los últimos años. Por cuestiones de simplicidad se remite al lector a la referencia [17]. Dado el vector de estado inicial $\hat{\mathbf{x}}_0$ y la covarianza inicial de su error de estimación, \mathbf{P}_0 , esta técnica recursiva estima $\mathbf{x}_{t|t}$ y $\mathbf{P}_{t|t}$ sobre el horizonte de tiempo $t=\{1;\dots;T\}$ en base al conocimiento de la dinámica del sistema y de las mediciones disponibles. Primero, el filtro UKF predice $\hat{\mathbf{x}}_{t|t-1}$ y $\mathbf{P}_{t|t-1}$ usando las observaciones hasta el instante $t-1$. Luego, se procesa el vector de medición \mathbf{y}_t y se actualizan $\hat{\mathbf{x}}_{t|t}$ y $\mathbf{P}_{t|t}$.

Para una RS dada, el error de estimación de la j -ésima variable de estado calculada usando UKF, $\varepsilon_j(\mathbf{q}) \forall j=1;\dots;J$ es:

$$\varepsilon_j(\mathbf{q}) = T^{-1} \sum_{t=1}^T [\mathbf{P}_{t|t}(\mathbf{q})]_j \quad (5)$$

Luego, el EGE calculado como el promedio de los errores de estimación de todas las variables de estado, es:

$$\beta_2(\mathbf{q}) = J^{-1} \sum_{j=1}^J \varepsilon_j(\mathbf{q}) \quad (6)$$

III. GRADO DE OBSERVABILIDAD Y PRECISIÓN

En muchos casos, los sensores instalados para el monitoreo del SDNL pueden fallar afectando directamente la observabilidad del sistema y la precisión de las estimaciones. Este inconveniente puede superarse diseñando RSs robustas que contemplen la pérdida circunstancial de mediciones, .

Considerando que existe solo un potencial sensor para cada variable medible del sistema, una RS tiene un $\text{GOP} = \eta$ si el sistema es observable aun cuando η variables medidas no están disponibles. En este caso existen $\omega = (\alpha!)/(\eta!(\alpha-\eta)!)$ RSs de dimensión $(\alpha-\eta)$, que son capaces de observar el sistema. Cabe destacar que tanto los α sensores de la RS original, como los $(\alpha-\eta)$ instrumentos de las RSs resultantes pertenecen al conjunto Φ que contiene todos los posibles candidatos. Entonces, el vector \mathbf{q} se redefine como el vector \mathbf{q}^* que contiene $(\alpha-\eta)$ elementos distintos de cero. Luego, $\beta_3(\mathbf{q}^*) = \text{rango}(\Xi^*)$, siendo $\Xi^* = \sum_{i=1}^I \mathbf{q}_i^* \Xi_i$. El SDNL es observable si:

$$\beta_3(\mathbf{q}^*) = J \quad (7)$$

donde $\beta_3(\mathbf{q}^*)$ para las ω configuraciones de RSs resultantes.

Del mismo modo el error de estimación de la j -ésima variable calculada cuando η variables medidas no están disponibles es: $\varepsilon_j(\mathbf{q}^*) = T^{-1} \sum_{t=1}^T [\mathbf{P}_{t|t}(\mathbf{q}^*)]_j$, y el error global de estimación, $\beta_4(\mathbf{q}^*)$ es:

$$\beta_4(\mathbf{q}^*) = J^{-1} \sum_{j=1}^J \varepsilon_j(\mathbf{q}^*) \quad (8)$$

Observación 2: Cuando $\eta = 0$, el sistema no admite la pérdida circunstancial de mediciones, $\omega = 1$, entonces $\mathbf{q}^* = \mathbf{q}$, y por lo tanto $\beta_3(\mathbf{q}^*) = \beta_1(\mathbf{q})$ y $\beta_4(\mathbf{q}^*) = \beta_2(\mathbf{q})$.

IV. PROBLEMA DE DISEÑO DE REDES SENSORES

A. Formulación del Problema de Diseño de Redes de Sensores

El problema de DRS propuesto consiste en seleccionar un subconjunto de variables medidas que pertenecen a Φ , tales que se minimice el EGE satisfaciendo restricciones de observabilidad y presupuesto cuando η variables medidas no están disponibles. Si se considera que existe solo un potencial sensor para medir cada variable medible del sistema, de costo c_i , el vector de costo de los instrumentos es: $\mathbf{c} = [c_1, \dots, c_i, \dots, c_I]^T$, y el costo del sistema de instrumentación de la planta es $\beta_5(\mathbf{q}) = \mathbf{c}^T \mathbf{q}$. El problema de DRS previamente mencionado se formula como sigue:

$$\begin{aligned} & \text{Min } \beta_4(\mathbf{q}^*) \\ & \text{s. t.} \\ & \beta_3(\mathbf{q}^*) = J \\ & \beta_5(\mathbf{q}) \leq \beta_5^D \end{aligned} \quad (9)$$

donde β_5^D es el presupuesto disponible para la instrumentación de la planta y $\beta_4(\mathbf{q}^*)$ es el menor de los EGE de las ω RSs resultantes. La solución obtenida al resolver el problema (9), llamado problema de DRS 9, proporciona las estimaciones más precisas, aún en presencia de pérdida circunstancial de mediciones para un β_5^D dado.

Observación 3: Cuando $\eta = 0$, el problema de problema de DRS 9 se convierte en el siguiente:

$$\begin{aligned} & \text{Min } \beta_2(\mathbf{q}) \\ & \text{s. t.} \\ & \beta_1(\mathbf{q}) = J \\ & \beta_5(\mathbf{q}) \leq \beta_5^D \end{aligned} \quad (10)$$

B. Algoritmo de Resolución del Problema de Diseño

Para resolver los problema de DRS 9 se utiliza el algoritmo de búsqueda transversal con criterios de corte [5,18]. Este consiste en explorar los nodos de un árbol de búsqueda, nivel por nivel, y de izquierda a derecha en orden creciente de costo. Existen 2^I nodos y cada uno representa un vector \mathbf{q} cuyo costo es $\beta_5(\mathbf{q})$.

La aplicación de este algoritmo consta de dos etapas. En la primera, denominada Etapa de Pasos Preliminares, se realizan los cálculos previos a la exploración de los nodos del árbol. Primero se establece el estado inicial del sistema y se simula el SDNL como se propuso en el trabajo [8] para obtener las matrices Ξ_i para cada posible variable medida. Después, se fijan las matrices \mathbf{R}_i y \mathbf{Q}_i , se simula el SDNL y se obtiene una matriz $\mathbf{Y} \in R^{T+1,I}$, cuyos elementos representan la trayectoria de todas las mediciones. Finalmente se establecen el vector $\hat{\mathbf{x}}_0$, la matriz \mathbf{P}_0 y un límite superior para el costo β_5^D y para el error de estimación β_4^* . Este último valor se fija inicialmente como el mínimo error global de estimación del primer nodo que satisface los requisitos de diseño que lo preceden en el algoritmo de la Figura 2, y por lo tanto, la condición $\beta_4(\mathbf{q}^*) \leq$

β_4^* se analiza a partir del nodo siguiente. Luego, se exploran los nodos del árbol hasta que alguno de los criterios de corte se satisface [18].

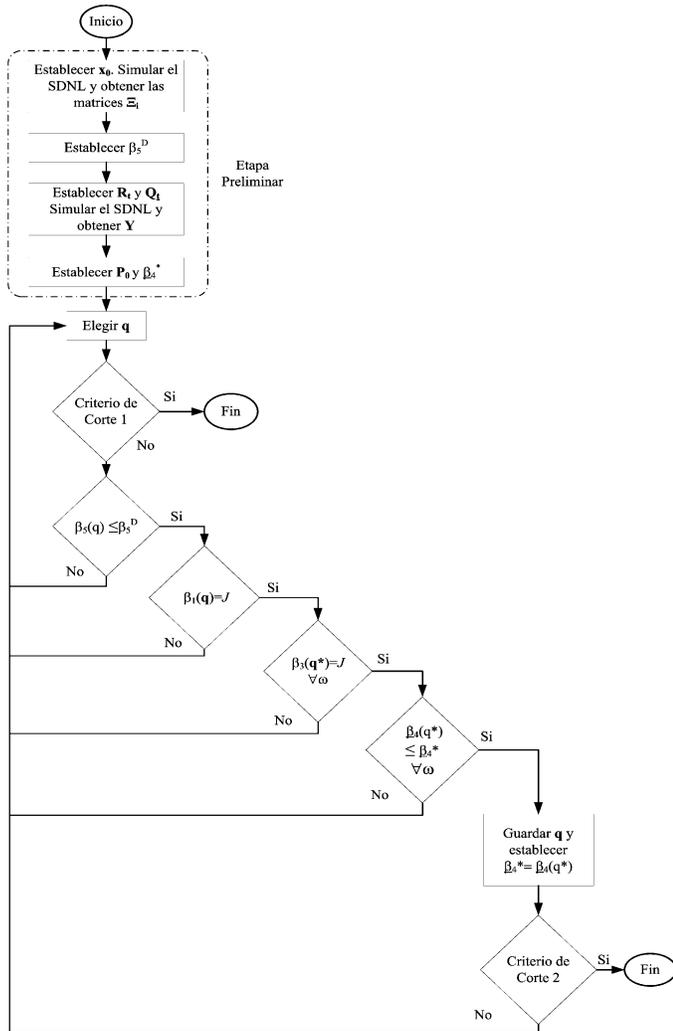


Fig. 2. Algoritmo de búsqueda problema de DRS 9.

V. RESULTADOS

A. Caso de Estudio

Se utilizó como caso de estudio para evaluar la metodología de localización óptima de sensores propuesta el proceso de polimerización de los comonómeros MM y AV, el cual comprende 3 unidades principales: un Reactor, un Separador de fases y un Tanque Caliente [19, 20]. Está representado por un modelo matemático de primeros principios, el cual incluye balances de masa y energía en las tres unidades mencionadas.

La corriente de alimentación fresca F1 que contiene los comonómeros, el iniciador azoisobutironitrilo (AIBN), benceno como disolvente (B), una baja concentración del inhibidor m-dinitrobenzoceno (Inh) y acetaldehído como agente de transferencia de cadena (CTA) se mezcla con la corriente de reciclo F2 que proviene del tanque caliente, formando la corriente de alimentación al reactor F3. El polímero se separa en el reactor y abandona el mismo en la corriente F4 junto con parte de los monómeros que no reaccionaron. Luego, esta corriente entra en la unidad de separación donde el producto

(corriente F6) se separa de los monómeros no reaccionados y el disolvente (corriente F7). Una parte de esta corriente, (F8), abandona el proceso a través de la purga, y el resto, (F9), se almacena en el tanque caliente. La corriente F5 corresponde a los servicios auxiliares. La notación de las variables de estado que describen el sistema se muestra en la Tabla 2. Las variables de entrada son: F1, T_j y ξ , siendo esta última la relación de purga.

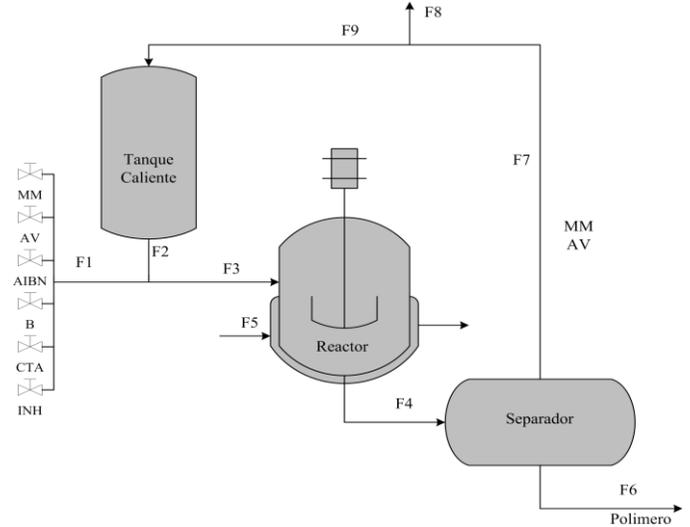


Fig. 3 Diagrama del proceso.

Los balances de masa y momento en el reactor se expresan a través de las siguientes ecuaciones:

$$dC_k/dt = [(C_{k,f} - C_k)/\tau_R] + \phi_{C_k} \quad (11)$$

$$d\gamma_l^r/dt = [(\gamma_{l,f}^r - \gamma_l^r)/\tau_R] + \phi_{\gamma_l^r} \quad (12)$$

$$d\delta_m/dt = [(\delta_{m,f} - \delta_m)/\tau_R] + \phi_{\delta_m} \quad (13)$$

donde $k = MM, AV, AIBN, B, CTA, INH$; $l = MM, AV$; el subíndice f indica la corriente de alimentación, $m = 0, 1, 2$, τ_{Rx} representa el tiempo de residencia en el reactor, y $\phi_{C_k}, \phi_{\gamma_l^r}, \phi_{\delta_m}$ son las velocidades de reacción.

Además, el balance de energía en esta unidad es:

$$dT_R/dt = [(T_{R,f} - T_R)/\tau_{Rx}] + \left[\frac{(-\Delta H_{paa} k_{paa} C_{MM} C_{MM}^r + (-\Delta H_{pba} k_{pba} C_{MM} C_{AV}^r)) / \rho_{Rx} C_{p,Rx}}{\rho_{Rx} C_{p,Rx}} \right] + \left[\frac{(-\Delta H_{pab} k_{pab} C_{AV} C_{MM}^r + (-\Delta H_{pbb} k_{pbb} C_{AV} C_{AV}^r))}{\rho_{Rx} C_{p,Rx}} \right] - [U_R A_R (T_R - T_{ja}) / V_R \rho_{Rx} C_{p,Rx}] \quad (14)$$

En el modelo dado por las ecuaciones 11-14, C_{MM}^r y C_{AV}^r son la concentración global de los radicales con MM y AV como unidades terminales respectivamente, ρ_{Rx} y $C_{p,Rx}$ representan la densidad y la capacidad calorífica de la mezcla de reacción, además $\Delta H_{paa}, \Delta H_{pba}, \Delta H_{pab}$ y ΔH_{pbb} son las entalpías de reacción, $k_{paa}, k_{pba}, k_{pab}$ y k_{pbb} son los parámetros cinéticos de las reacciones de propagación, $a=MM, b=AV$, U_R es el coeficiente de transferencia de calor, A_R es el área de transferencia de calor y V_R es el volumen del reactor. Las expresiones matemáticas para los balances de masa en el separador y en el tanque caliente son similares a las expresadas en la ecuación 11.

TABLA II
VARIABLES DE ESTADO DEL SISTEMA

VARIABLES	Notación
CM de MM en el reactor	C_{MM}
CM de AV en el reactor	C_{AV}
CM de AIBN en el reactor	C_{AIBN}
CM de B en el reactor	C_B
CM de CTA en el reactor	C_{CTA}
CM de Inh en el reactor	C_{Inh}
CM de MM en el separador	$C_{MM,S}$
CM de AV en el separador	$C_{AV,S}$
CM de AIBN en el separador	$C_{AIBN,S}$
CM de B en el separador	$C_{B,S}$
CM de CTA en el separador	$C_{CTA,S}$
CM de Inh en el separador	$C_{Inh,S}$
CM de MM en el tanque caliente	$C_{MM,C}$
CM de AV en el tanque caliente	$C_{AV,C}$
CM de AIBN en el tanque caliente	$C_{AIBN,C}$
CM de B en el tanque caliente	$C_{B,C}$
CM de CTA en el tanque caliente	$C_{CTA,C}$
CM de Inh en el tanque caliente	$C_{Inh,C}$
Temperatura en el reactor	T_R
Composición de MM	Q_{MM}
Composición de AV	Q_{AV}
Momento de orden cero	ψ_0
Momento de primer orden	ψ_1
Momento de segundo orden	ψ_2
Temperatura de la camisa	T_J
Velocidad de producción de polímero	G_{pi}

Donde CM es Concentración Molar. Las unidades son kmol/m^3 para las concentraciones molares, para las composiciones de los copolímeros y para el momento de orden 0, K para la temperatura en el reactor y en la camisa, kg/m^3 y $\text{kg}^2/\text{kmol.m}^3$ para los momento de primer y segundo orden, y kg/min para la velocidad de producción de polímero.

Las concentraciones y la conversión se determinan a través de espectroscopia, los pesos moleculares se calculan a partir de los datos de dispersión de luz estática de múltiples ángulos, con un tiempo de retardo menor al tiempo de muestreo de 5 minutos, los cuales son instalados como se muestra en la referencia [21]. Si todas las variables son medidas, el modelo de las mediciones completo es $\mathbf{y} = [T_R T_J G_{pi} \psi_2/\psi_1 C_{MM} C_{AV} C_{MM,S} C_{AV,S} C_{MM,C} C_{AV,C} Q_{MM}/(Q_{MM}+Q_{AV})]^T$, mientras que el vector de costos $\mathbf{c} = [10 \ 10 \ 100 \ 400 \ 500 \ 500 \ 500 \ 500 \ 500 \ 500]^T$. La precisión de los instrumentos se fija de acuerdo a la utilizada en la literatura para procesos de polimerización, siendo de 99% para los sensores que miden T_R y T_J , 95% para G_{pi} y 92% para los sensores restantes y se asuma que existe un sensor candidato por cada posible i -ésima variable medida. Los elementos de la matriz \mathbf{R}_t se establecen de acuerdo con la precisión de los sensores.

Además, \mathbf{Q}_t se ajusta mediante simulaciones preliminares del UKF utilizando la matriz \mathbf{Y} completa. Para que el modelo del proceso capture la dinámica del sistema de manera efectiva, los componentes de la diagonal de la matriz \mathbf{Q}_t se calculan

como pequeños porcentajes del estado inicial \mathbf{x}_0 suponiendo que los ruidos de proceso tienen una distribución gaussiana.

Debido a los requisitos de operación, la velocidad de producción de polímero se aumenta un 10%. El vector \mathbf{x}_0 está muy cerca del estado estable inicial y es $[0.2535, 5.8386, 0.0020, 2.7574, 0.3663, 0, 353.44, 0.8223, 0.4181, 0.0054, 119.7100, 4.18 \cdot 10^6, 0.2536, 5.8385, 0.0020, 2.7576, 0.3664, 0, 0.3156, 7.2666, 0, 3.4320, 0, 0, 336.15, 0.408]^T$, mientras que los elementos diagonales de \mathbf{P}_0 son pequeños. Con respecto a los parámetros del filtro, estos se ajustan en los siguientes valores: $a = 1$; $b = 2$; $c = 0$; $d = 0$ y el número de puntos sigma es 53.

La trayectoria de las mediciones completa, $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_{t=0}, \mathbf{y}_{t=1}, \mathbf{y}_{t=2}, \dots, \mathbf{y}_{t=h}]$, siendo $h = 150$ min, se generó mediante simulación dinámica del sistema incorporando ruidos de proceso y acciones de control (\mathbf{u}).

B. Resultados Obtenidos

Se formuló el problema de DRS 9 para diferentes presupuestos de instrumentación y $\text{GOP} = 0$ y 1. Los problemas planteados fueron resueltos utilizando el algoritmo de búsqueda transversal descrito en la sección anterior, y se construyen los modelos de las mediciones con las soluciones obtenidas. Luego, se realizaron 10 repeticiones por cada solución obtenida, (veces en las que se monitoreo la evolución de las variables) para determinar la consistencia de los resultados con los ensayos de simulación.

TABLA III
RESULTADOS PROBLEMA DE DRS 9

Presupuesto	Solución GOP = 0	Solución GOP = 1
1500	$T_R; T_J; G_{pi}; \psi_2/\psi_1; Q_{MM}/(Q_{MM}+Q_{AV})$	$T_R; T_J; \psi_2/\psi_1; C_{AV,C}; Q_{MM}/(Q_{MM}+Q_{AV})$
2500	$T_R; T_J; G_{pi}; \psi_2/\psi_1; C_{MM}; C_{MM,S}; Q_{MM}/(Q_{MM}+Q_{AV})$	$T_R; T_J; \psi_2/\psi_1; C_{MM}; C_{MM,S}; C_{AV,C}; Q_{MM}/(Q_{MM}+Q_{AV})$
3500	$T_R; T_J; G_{pi}; \psi_2/\psi_1; C_{MM}; C_{MM,S}; C_{AV,S}; C_{MM,C}; Q_{MM}/(Q_{MM}+Q_{AV})$	$T_R; T_J; \psi_2/\psi_1; C_{MM}; C_{MM,S}; C_{MM,C}; C_{AV,C}; Q_{MM}/(Q_{MM}+Q_{AV})$

Como puede observarse en la tabla anterior un aumento en el límite del presupuesto de instrumentación modifica las soluciones obtenidas al resolver el problema de DRS 9. La solución que minimiza el EGE y satisface las restricciones de observabilidad y costo para un $\beta_5^D = 1500$ es $\text{RS} = [T_R; T_J; G_{pi}; \psi_2/\psi_1; Q_{MM}/(Q_{MM}+Q_{AV})]$, y su costo es 1020 (Solución 1). Luego, la solución obtenida para el siguiente límite en el presupuesto de instrumentación incorpora los sensores C_{MM} y $C_{MM,S}$ a la solución anterior disminuyendo el EGE un 29.7% (Solución 2). Al aumentar el β_5^D a 3500, la $\text{RS} = [T_R; T_J; G_{pi}; \psi_2/\psi_1; C_{MM}; C_{MM,S}; C_{AV,S}; C_{MM,C}; Q_{MM}/(Q_{MM}+Q_{AV})]$, (Solución 3), cuyo costo es de 3020 y el β_2 es 36.0% inferior al de la primera.

También se resolvió el problema de DRS 9 para un $\text{GOP}=1$. Las soluciones (Solución 4-6) difieren a las obtenidas al resolver el problema de diseño para un $\text{GOP}=0$. La variable medida G_{pi} es reemplazada por $C_{AV,C}$ cuyo costo es 5 veces mayor. Esto se debe a que las RSs obtenidas para un $\text{GOP} = 0$ no garantizan la observabilidad del sistema cuando un sensor

falla. Un aspecto importante para destacar es que las RSs con un $GOP=1$ tienen un costo mayor a las obtenidas para un $GOP=0$. Esto se debe a que los sensores que miden concentraciones molares son más costosos que los sensores que miden la velocidad de producción de polímero.

Luego, definiendo $\varpi = EGE(\text{Solución actual}) / EGE(\text{Solución 1}) * 100$, en la Figura 4 se muestra la reducción que se obtiene en el EGE al incrementar el presupuesto de instrumentación de la planta. Por otro lado, también se observa que el EGE de las RSs obtenidas para un $GOP = 1$ aumenta un 7.9%; 7.1% y 6.7% con respecto a las encontradas cuando $GOP = 0$. Esto se debe a que el sensor $C_{AV,C}$ es menos preciso que el G_{pi} , pero asegura que el sistema sea observable a través de cualquiera de las RSs resultantes cuando uno de los sensores está temporalmente no disponible.

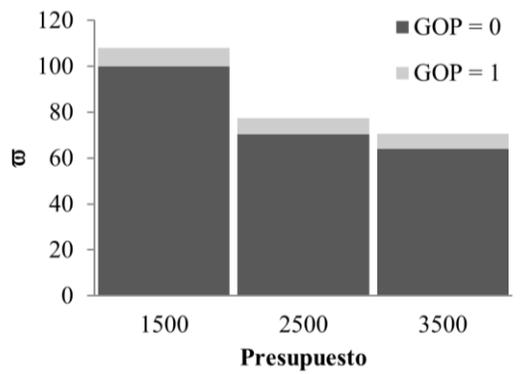


Fig. 4. Relación entre EGE y presupuesto.

En la Figura 5 se muestra el desempeño del UKF cuando $RS = \{T_R; T_J; \psi_2/\psi_1; C_{AV,C}; \varrho_{MM}/(\varrho_{MM} + \varrho_{AV})\}$, (Solución 4). La trayectoria de G_{pi} obtenida a través de simulación del proceso se muestra con línea negra continua, mientras que las trayectorias estimadas con el filtro se muestran en líneas discontinuas en distintas escalas de grises, siendo UKF(q) la obtenida al utilizar el modelo de las mediciones dado por la Solución 4, y (UKF(q*=1); ...; UKF(q*=5)), las trayectorias estimadas cuando los instrumentos $\varrho_{MM}/(\varrho_{MM} + \varrho_{AV})$; $C_{AV,C}$; ψ_2/ψ_1 ; T_J y T_R , respectivamente, no lo están de a uno por vez, mientras que los $\varpi(q^*) = \varpi = EGE(q^*) / EGE(\text{Solución 4}) * 100$, son: 110.7; 113.2; 114.1; 115.0 y 115.2 para los (q*=1; ...; 5).

Finalmente se realizó un análisis de sensibilidad modificando aleatoriamente los elementos de \mathbf{x}_0 y de la matriz \mathbf{P} en un rango de $\pm 15\%$ y las soluciones obtenidas no difieren de la mostradas en la Tabla 3.

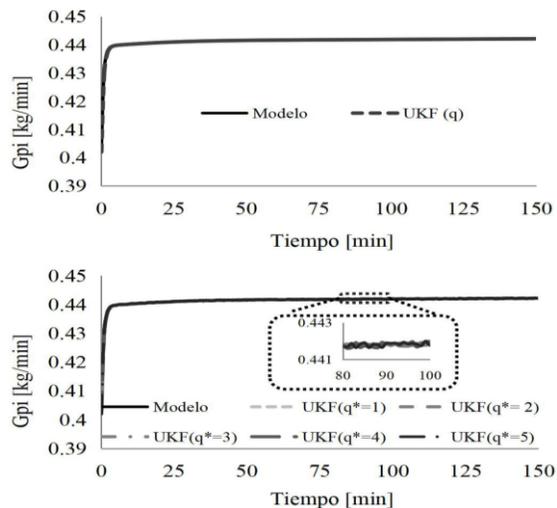


Fig. 5. Velocidad de producción de polímero.

VI. CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó una estrategia de DRS para monitoreo de procesos químicos dinámicos no lineales cuando uno o más sensores pueden fallar. A diferencia de los trabajos existentes en la bibliografía esta es la primera vez que se tiene en cuenta el efecto de la pérdida temporal de mediciones sobre la observabilidad y la precisión cuando se utiliza el UKF como estrategia de estimación de estados.

Se definió el GOP como la cantidad de sensores que pueden estar temporalmente no disponibles mientras el sistema sigue siendo observable y se formuló el problema de DRS que minimiza el EGE sujeto a restricciones de observabilidad y costo. Los problemas formulados se resolvieron utilizando un algoritmo de búsqueda transversal con criterio de corte, que evalúa los requerimientos de diseño de forma secuencial y en orden creciente de carga computacional.

Se realizó un análisis de sensibilidad que tiene en cuenta posibles cambios en las condiciones iniciales, en los elementos de la matriz de ruido del proceso y en las trayectorias de las mediciones para verificar la robustez de la técnica de instrumentación propuesta. La metodología de DRSs se puede adaptar fácilmente a los procesos monitoreados por otros filtros de Kalman no lineales. Además, el problema de actualizar la RS de una planta de procesos se puede abordar modificando las restricciones del problema de optimización propuesto.

El desarrollo de nuevos índices de desempeño para evaluar las RSs así como también el desarrollo de algoritmos de resolución híbridos están actualmente bajo investigación.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo contó con el apoyo del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), del Instituto de Ingeniería Química (IIQ) de la UNSJ y el Departamento de Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Sur.

REFERENCES

- [1] S. Julier, J. Uhlmann, H. F. Durrant-Whyte, (2000). "A new method for the nonlinear transformation of means and covariances in filters and estimators" *IEEE Trans. Autom. Control* 45 (3) pp. 477–482.

- [2] M. Mallick, X. Tian, J. Liu, (2021) *Evaluation of Measurement Converted KF, EKF, UKF, CKF, and PF in GMTI Filtering*, 2021 International Conference on Control, Automation and Information Sciences (ICCAIS), 21-27.
- [3] J. A. Romagnoli, M.C. Sánchez, "Data Processing and Reconciliation for Chemical Process Operations" Elsevier, 1999
- [4] M. Bhushan, R. Rengaswamy, (2002) "Comprehensive design of a sensor network for chemical plants based on various diagnosability and reliability criteria. I. Framework." *Ind. Eng. Chem. Res.* 41, pp. 1826-1832.
- [5] L. Rodriguez, J. Tupaz, M. Sánchez, (2021) "Sensor location for nonlinear state estimation", *J. Process Control*, 100, 11-19
- [6] M. Bagajewicz, "Design and Upgrade of Process Plant Instrumentation" *Technomic Publishing Company, PA*, 2000
- [7] P. Mobed, J. Maddala, P. Pednekar, D. Bhattacharyya, R. Rengaswamy (2015) "Optimal Sensor Placement for Fault Diagnosis Using Magnitude Ratio." *Ind. Eng. Chem. Res.* 54 (38), pp. 9369-9381
- [8] O. Prakash, M. Bhushan, S. Narasimhan, R. Rengaswamy, (2020) "Sensor network design based on system-wide reliability criteria. Part I: Objectives." *J. Process Control.* 93, 7, pp. 66-82
- [9] O. Prakash, M. Bhushan, S. Narasimhan, R. Rengaswamy, (2020) "Sensor network design based on system-wide reliability criteria. Part II: Formulations and applications." *J. Process Control.* 93, 5, pp. 14-27
- [10] M. Bagajewicz, M. Sánchez, (2000) "Cost-optimal design of reliable sensor networks", *Computers and Chemical Engineering*, 23, (11-12), pp. 1757-1762
- [11] M. Carnero, J. Hernández, M. Sánchez, (2018) "Optimal Sensor Location in Chemical Plants Using the Estimation of Distribution Algorithms." *Ind. Eng. Chem. Res.* 57 (36), pp. 12149-12164
- [12] E. Musulin, C. Benqilou, M.J. Bagajewicz, L. Puigjaner, (2005) "Instrumentation design based on optimal Kalman filtering" *J. Process Control* 15 (6) pp. 629-638
- [13] A. K. Singh, J. Hahn, (2005) "Determining Optimal Sensor Locations for State and Parameter Estimation for Stable Nonlinear Systems", *Ind. Eng. Chem. Res.* 44, pp. 5645-5659
- [14] A. K. Singh, J. Hahn, (2006). "Sensor location for stable nonlinear dynamic systems: multiple sensor case", *Ind. Eng. Chem. Res.* 45 pp. 3615-3623
- [15] V. Mohammadnia, K. A. Salahshoor, (2012). "New comprehensive sensor network design methodology for complex nonlinear process plants", *Iranian J. Chem. Eng.* 31 (3) pp.145-156
- [16] P. Paul, D. Bhattacharyya, R. Turton, S.E. Zitney, (2017), "Nonlinear dynamic model based multi objective sensor network design algorithm for a plant with an estimator-based control system", *Ind. Eng. Chem. Res.* 56 (26) pp. 7478-7490.
- [17] M. A. Jarinah, H. Hoang, M. A. Hussain, D. Dochain, (2015) "Review and classification of recent observers applied in chemical process systems", *Comput. Chem. Eng.* 76, pp. 27-41.
- [18] D. Nguyen, M.J. Bagajewicz, (2011). "New efficient breadth-first/level traversal tree search method for the design and upgrade of sensor networks", *AIChE J.* 57(5) pp. 1302-13029
- [19] R. Galdeano, M. Astesuaín, M. Sánchez, (2011) "Unscented transformation based filters: Performance comparison analysis for the state estimation in polymerization processes with delayed measurements", *Macromol. React. Eng.* 5 (7-8) pp. 278-293.
- [20] B. A. Ogunnaïke, W. H. Ray, (1994) "Process Dynamics, Modeling and Control", Oxford University Press, Oxford, UK
- [21] S. D. Salas y otros (2018). "Framework design for weight-average molecular weight control in semi-batch polymerization" *Control Eng. Pract.* 78, pp. 12-23.



First A. Leandro Rodriguez received the Food Processing Engineering degree from the National University of San Juan – Argentina, in 2008. Then, he received the Ph.D. in Chemical Engineering from the National University of the South – Argentina, in 2015. He is a Research Fellow of the Council for Scientific and Technological Research, Argentina, since 2018. At this time, he is dedicated to process engineering, specifically to optimization and control of multivariable nonlinear systems. His main

research interests include modeling, state estimation, optimization, sensor location and trajectory tracking control of chemical process and water systems.



Second A. Nadia Pantano received the Chemical Engineering degree from the National University of San Juan – Argentina, in 2008. Then she received the Doctorate in Chemical Engineering – Mention Clean Processes degree from the National University of San Juan – Argentina, in 2019. At this time, she is dedicated to process engineering, specifically to optimization and control of multivariable non-linear processes. Her main research interests include modeling, state estimation, and trajectory tracking control of biochemical processes.



Third A. Gustavo Scaglia received the Eng. degree in Electronic Engineering with orientation in Control Systems from the National University of San Juan, Argentina, in 1999, and the Ph.D in Control Systems from the Institute of Automatic Control at the National University of San Juan, Argentina in 2006, his work was about a new tracking trajectories algorithms. He is a Research Fellow of the Council for Scientific and Technological Research, Argentina, since 2011. He leads different technological projects and his current scientific research at the Engineering Chemical Institute from National University of San Juan. His main interests are algorithms for tracking trajectories, nonlinear and adaptive control theory, mechanical and chemical process.



Forth A. Mabel Sánchez received the Chemical Engineering degree from the National University of the South, Argentina, in 1982, and the Ph.D. in Chemical Engineering from the National University of the South, Argentina, in 1996. She is a Research Fellow of the Council for Scientific and Technological Research, Argentina, since 2001. She leads different technological projects and at this time, she is dedicated to process engineering, specifically to monitoring and statistical process control of nonlinear systems. Her main research interests include robust state estimation, sensor network design, and statistical process control of chemical process and water systems.