



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

COMPARAÇÃO ENTRE ESTIMADORES PARA RECONCILIAÇÃO DINÂMICA DE DADOS E ESTRATEGIAS DE DETECÇÃO DE ERROS GROSSEIROS

Andrea C. Farias¹, Ricardo G. Duraiski¹, Argimiro R. Secchi²

¹ Grupo de Integração, Modelagem, Simulação e Controle de Processos (GIMSCOP)
Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)
R. Eng. Luis Englert, s/n. Campus Central. CEP: 90040-040 - Porto Alegre - RS - BRASIL
E-MAIL: {[dea](mailto:dea@enq.ufrgs.br), [rduraisk](mailto:rduraisk@enq.ufrgs.br), [arge](mailto:arge@enq.ufrgs.br)}@enq.ufrgs.br

Palavras Chaves: *Reconciliação dinâmica de dados, Detecção de erros grosseiros*

Resumo: O objetivo deste trabalho é comparar estimadores para reconciliação dinâmica de dados e algoritmos de detecção de erros grosseiros. O problema de reconciliação dinâmica de dados é tratado usando-se cinco diferentes formulações para o filtro de Kalman estendido e um estimador de horizonte móvel (MHE). Os estimadores são comparados utilizando-se um exemplo dinâmico não-linear, em cenários transientes. Os problemas de detecção de erros grosseiros e estimação de bias são tratados usando-se dois algoritmos diferentes, combinados com o teste global: O teste da razão generalizada de máxima verossimilhança (GLR), proposto por Narashiman e Mah (1988), e um método de detecção de bias proposto por McBrayer e Edgar (1995). Os resultados da reconciliação de dados mostram que não existem diferenças significantes quanto à qualidade dos estados reconciliados obtidos pelos estimadores. Por outro lado, o tempo gasto na reconciliação de dados difere consideravelmente entre os diferentes estimadores. A implementação das estratégias propostas para a detecção de erros grosseiros mostra que o GLR é mais simples e utiliza menos tempo computacional que o algoritmo proposto por McBrayer e Edgar. Neste trabalho ainda é mostrada uma implementação alternativa do uso combinado do teste global e do GLR, que consiste em avaliar o teste global um número finito de vezes e não de maneira cumulativa como proposta no GLR original.

1 Introdução

A otimização em linha e em tempo real gera set-points para o sistema de controle distribuído e mantém o processo próximo da sua ótima condição operacional. Esta otimização requer um modelo de processo preciso onde são necessários dados reconciliados para especificar o estado atual do processo e para estimar os parâmetros do modelo. O principal objetivo da reconciliação de dados é ajustar as medidas de processo com erros aleatórios de modo que estas satisfaçam as restrições de balanços de massa e energia. Durante o passo de reconciliação de dados é natural assumir a presença de erros aleatórios, normalmente distribuídos, com média zero e variâncias conhecidas. Entretanto, um

tipo de erro diferente – chamado erro grosseiro – as vezes pode estar presente nos dados de processo. Este apresenta média diferente de zero e, ao passar pelo processo de reconciliação, será espalhado por todo o conjunto de dados. Quando informação contendo erros grosseiros é usada para estimação de estados e controle de processos, o estado do sistema é mal representado e o desempenho resultante pode ser insatisfatório ou ainda levar o processo a operar em um ponto sub-ótimo e até inseguro. A eliminação de erros grosseiros é atingida utilizando-se técnicas específicas para a sua detecção, identificação de sua localização e eliminação. O objetivo deste trabalho é comparar estimadores para



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

reconciliação dinâmica de dados e algoritmos de detecção de erros grosseiros. Para isto, foram utilizadas cinco diferentes formulações do filtro de kalman estendido e um estimador baseado em horizonte móvel. Os estimadores foram comparados usando-se um exemplo dinâmico não-linear. As formulações para o filtro de Kalman estendido são: Kalman-Bucy (EKF), com restrições (CEKF), discreto (DEKF), Discreto modificado (MDEKF) e Contínuo (CtEKF). A formulação para o MHE é similar à de um controle preditivo não-linear (NMPC). A principal diferença entre estes algoritmos é que o NMPC otimiza e prediz avançando no tempo, enquanto o MHE otimiza suavizando o passado. Além disto, no MHE, as estimativas dos estados passados medidos e as variáveis de entrada sobre um horizonte finito são ajustadas para satisfazer otimamente as equações de modelo. O problema de detecção de erros grosseiros (GED) e a estimação de bias são tratados usando-se dois algoritmos combinados com o teste global: O GLR, proposto por Narashiman e Mah (1988) e um método de detecção de bias, baseado em uma estratégia de horizonte móvel, proposta por McBrayer e Edgar (1995). Os algoritmos são comparados usando-se as cinco formulações para o filtro de Kalman. Adicionalmente é proposta uma implementação alternativa do uso combinado do teste global e do GLR, que consiste em avaliar o teste global um número finito de vezes e não de maneira cumulativa como proposta no GLR original.

2. Metodologia

2.1 Formulação do problema

Considerando os sistemas dinâmicos como sendo representados pelas equações algébrico-diferenciais

não-lineares como mostradas a seguir:

$$\dot{x}(t) = f[x(t), u(t), t, p(t)] + w(t)$$

$$y(t) = h[x(t), u(t), t] + v(t)$$

Onde x denota os estados, u as entradas determinísticas, p os parâmetros do modelo e y o vetor das variáveis medidas. O vetor de ruído de processo, $w(t)$ e o vetor erros das medidas $v(t)$ são assumidos como sendo gaussianos com média zero e covariâncias $Q(t)$ e $R(t)$, respectivamente.

Nas formulações, as matrizes Q e R são parâmetros de sintonia para reconciliar o modelo com as medidas de processo e são interpretados estatisticamente como sendo o grau de confiança no modelo e nos sensores de processo, respectivamente.

2.2 Formulações dos estimadores

O filtro de Kalman estendido é a técnica mais utilizada para problemas de estimação não-lineares utilizando-se o principio dos mínimos quadrados ponderados. As formulações (Tabela 1) usam linearização local para estender o espaço do filtro de kalman para sistemas descritos por equações diferenciais ordinárias não lineares. As vantagens das formulações EKF são: simplicidade, recursividade dos algoritmos e sua baixa carga computacional. Estas formulações são adequadas para aplicação em tempo real em escala industrial (Becerra ET AL., 2001). Por outro lado, a maior vantagem da aproximação por horizonte móvel, em relação às formulações EKF, é a sua capacidade de lidar com restrições nas variáveis e a sua flexibilidade em relação à escolha do critério de estimação. A desvantagem do MHE é a alta carga computacional para grandes horizontes de estimação em aplicações em linha.

Tabela 1. Formulações dos estimadores

	Etapa de Predição	Etapa de correção
EKF	$\hat{x}_k^- = \hat{x}_{k-1}^+ + \int_{k-1}^k f(\hat{x}, u, t) dt$ $P_k^- = P_{k-1}^+ + \int_{k-1}^k [F(t)P(t) + P(t)F(t)^T + Q(t)] dt$	$\hat{x}_k^+ = \hat{x}_k^- + K_k [y_k - \hat{y}_k] \quad K_k = P_k^- H_k^T [H_k P_k^- H_k^T + R]^{-1}$ $P_k^+ = [I - K_k H_k] P_k^- [I - K_k H_k]^T + K_k R K_k^T$
CtEKF	$\hat{x}_k^- = \hat{x}_{k-1}^+ + \int_{k-1}^k f(\hat{x}(t), u, t) dt$ $P_k^- = P_{k-1}^+ + \int_{k-1}^k \left[F(t)P(t) + P(t)F(t)^T - \right. \\ \left. - P(t)H(t)R^{-1}H(t)P(t) + Q \right] dt$	$K_k = P_k^- H_k^T [H_k P_k^- H_k^T + R]^{-1} \quad \hat{x}_k^+ = \hat{x}_k^- + K_k [(y_k - \hat{y}_k)]$



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

CEKF	$\hat{x}_k^- = \hat{x}_{k-1}^+ + \int_{k-1}^k f(\hat{x}, u, t) dt$	$\min_{\hat{w}_{k-1}} \left\{ \psi_k = \hat{w}_k (P_{k-1}^+)^{-1} \hat{w}_k^T + \hat{v}_k (R_d)^{-1} \hat{v}_k^T \right\}$ $\hat{x}_k^+ = \hat{x}_k^- + \hat{w}_k, \quad y_k = h(\hat{x}_k^+, k) + \hat{v}_k, \quad \hat{x}_{\min} \leq \hat{x}_k^+ \leq \hat{x}_{\max}$ $P_k = Q_d + \varphi_k P_{k-1} \varphi_k^T - \varphi_k P_{k-1} H_k^T [H_k P_{k-1} H_k^T + R_d]^{-1} H_k P_{k-1} \varphi_k^T$
DEKF	$\hat{x}_k^- = \hat{x}_{k-1}^+ + \int_{k-1}^k f(\hat{x}, u, \tau) d\tau \quad P_k^- = \varphi_k P_{k-1}^+ \varphi_k^T - Q_d$	$K_k = P_k^- H_k^T [H_k P_k^- H_k^T + R_d]^{-1}, \quad P_k^+ = P_k^- [I - K_k H_k]$ $\hat{x}_k^+ = \hat{x}_k^- + K_k [y_k - \hat{y}_k]$
MDEKF	$\hat{x}_k^- = \hat{x}_{k-1}^+ + \int_{k-1}^k f(\hat{x}, u, \tau) d\tau$	$K_k = P_k^- H_k^T [H_k P_k^- H_k^T + R_d]^{-1} \quad \hat{x}_k^+ = \hat{x}_k^- + K_k [y_k - \hat{y}_k]$ $P_k = Q_d + \varphi_k P_{k-1} \varphi_k^T - \varphi_k P_{k-1} H_k^T [H_k P_{k-1} H_k^T + R_d]^{-1} H_k P_{k-1} \varphi_k^T$
MHE	$\hat{x}_i^- = \hat{x}_{i-1}^+ + \int_{t_{i-1}}^{t_i} f(\hat{x}, u, t) dt = F(x_{i-1}, u_{i-1})$ <p>Onde $i=(k-N), \dots, K \quad x(0) = x_0 \quad \hat{y}_i^- = h(\hat{x}_i^-)$</p>	$\min_{\hat{w}_{k-N-1}, \dots, \hat{w}_k, \hat{v}_{k-N}, \dots, \hat{v}_k} \left\{ \psi_k = (\hat{w}_{k-N-1}^+)^T (P_{k-N}^-)^{-1} (\hat{w}_{k-N-1}^+ + \sum_{j=k-N}^k (\hat{v}_j^+)^T R^{-1} (\hat{v}_j^+) + \sum_{j=k-N}^k (\hat{w}_j^+)^T Q^{-1} (\hat{w}_j^+) \right\}$ $Sj \hat{a}: \hat{x}_{k-N}^+ = \hat{x}_{k-N}^- + \hat{w}_{k-N-1}, \quad \hat{x}_{j+1}^+ = F(\hat{x}_j^+) + \hat{w}_j \quad j = k-N, \dots, k-1$ $y_j = h(\hat{x}_j^+) + \hat{v}_j, \quad \hat{x}_{\min} \leq \hat{x}_j^+ \leq \hat{x}_{\max} \quad j = k-N, \dots, k$

2.3 Estratégias para detecção de erros grosseiros

O tratamento de erros grosseiros pode ser dividido em 3 estágios. No primeiro estágio, a detecção do erro grosseiro é feito para assegurar se existem erros grosseiros nas medidas do processo. Se a presença do erro é detectada, o próximo estágio é a identificação de sua localização. O estágio final é a eliminação do erro. O teste global foi introduzido por Ripps (1965) e a sua conclusão de que não existem erros grosseiros previne a identificação da localização deste. O teste global foi utilizado combinado com o GLR, sendo utilizado como primeiro indicativo da presença do erro grosseiro. O algoritmo completo pode ser encontrado em Narashiman e Jordache (2000). O GLR é baseado no princípio da máxima verossimilhança usado em estatística. A principal vantagem é a sua habilidade em identificar diferentes tipos de erros grosseiros. O algoritmo completo pode ser encontrado em Narashiman e Mah (1988). O segundo algoritmo usado neste trabalho foi feito para ser utilizado em conjunto com o MHE. A detecção do erro grosseiro e a sua estimação são feitos em dois problemas de reconciliação diferentes. A função objetivo inclui o erro grosseiro como parâmetro. O algoritmo completo pode ser encontrado em McBrayer e Edgar (1995). Este algoritmo apresenta uma premissa questionável, a qual usa um critério de

30% de diferença entre o caso base e as medições para determinar a existência de erros grosseiros no conjunto de medidas.

2.4 Caso de Estudo:

O caso de estudo apresentado neste trabalho é um reator CSTR, onde acontece uma reação exotérmica irreversível (Limqueco e Kantor, 1990). As equações do modelo, adimensionalizadas são dadas por: (Onde x_1 é a concentração adimensionalizada, x_2 é a temperatura adimensionalizada e u é a temperatura da jaqueta adimensionalizada)

$$\frac{dx_1}{d\tau} = -\theta x_1 k(x_2) + q(x_{1f} - x_1)$$

$$\frac{dx_2}{d\tau} = \beta \theta x_1 k(x_2) - (q + \delta)x_2 + \delta u + q x_{2f}$$

Os valores dos parâmetros nominais são mostrados na Tabela 2. Os algoritmos e as simulações foram implementados em *MATLAB 5.3*. O algoritmo de integração utilizado foi o *ode15s* e a otimização não linear foi resolvida utilizando a função *fmincon*.

Tabela 2. Parâmetros do Modelo

Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
θ	0.072	q	1.0
β	8	x_{1f}	1.0
δ	0.3	x_{2f}	0
γ	20	$x_{1s}(ee)$	0.856



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

3. Resultados

Inicialmente foram comparadas as performances dos estimadores. O modelo foi sujeito à distúrbios na concentração de entrada x_{1f} . Os distúrbios e os valores de saída simulados, sem ruído, podem ser vistos na Figura 1. Após a simulação, ruído branco aleatório, com variância conhecida foi adicionado nas variáveis de saída e as variáveis resultantes foram tomadas como sendo os valores medidos para os estimadores. Os parâmetros utilizados nos estimadores são listados na Tabela 3. Os resultados foram obtidos após 10 rodadas, com a adição de diferentes ruídos aleatórios a cada rodada, em cada variável. Os resultados dos dados reconciliados são mostrados na Figura 2 e na Figura 3.

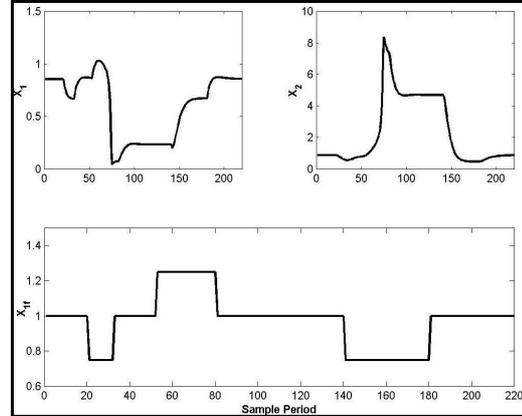


Figura 1. Distúrbios de entrada em x_{1f} variáveis de saída simuladas

Tabela 3. Parâmetros dos estimadores

Parâmetros	Valores	Parâmetros	Valores
Frequência de amostragem	0.25	Q	$\begin{bmatrix} 1e-4 & 0.2e-4 \\ 0.2e-4 & 0.2e-4 \end{bmatrix}$
Q_d	$(Q \times \Delta t)$		
R_d	$(R / \Delta t)$	R	$\begin{bmatrix} 2.4e-4 & 0 \\ 0 & 2.4e-4 \end{bmatrix}$
Variância do ruído branco	2.4×10^{-4}		
Horizonte do MHE	5		

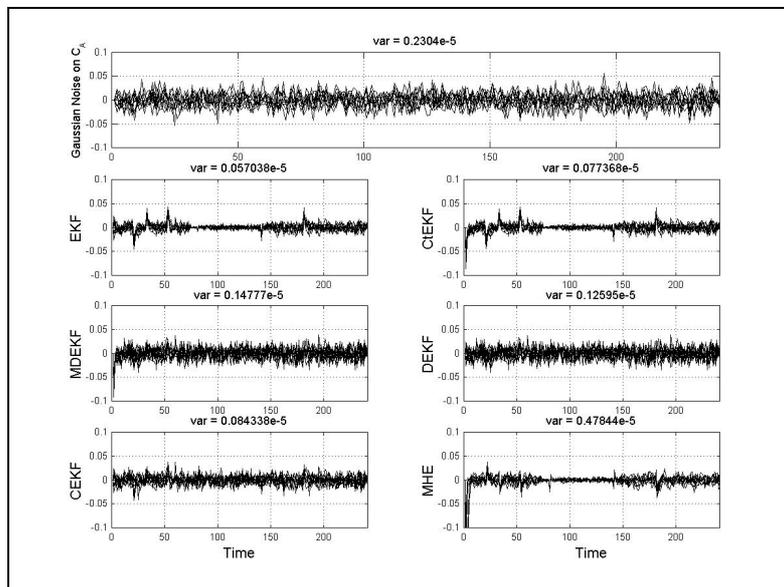


Figura 2. Diferença entre a variável reconciliada e a variável medida x_1 , para todos os estimadores



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

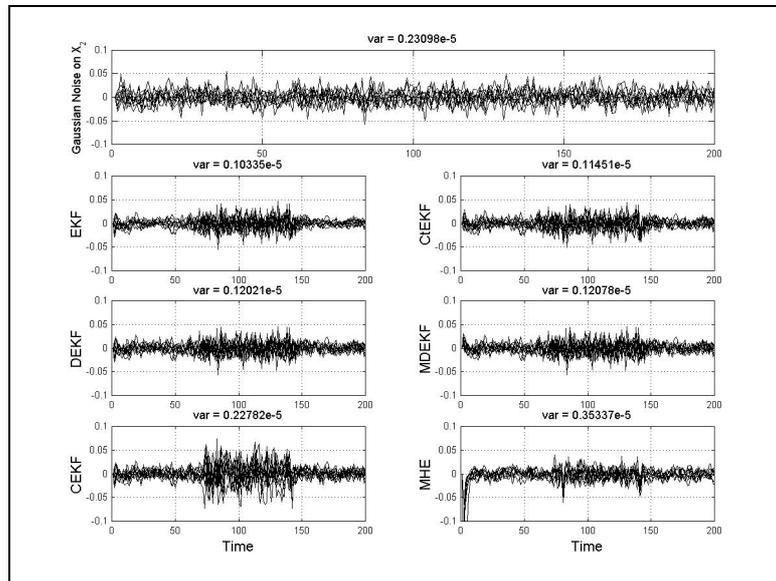


Figura 3. Diferença entre a variável reconciliada e a variável medida x_2 , para todos os estimadores

Todos os estimadores, excluindo-se o MHE, mostraram diferentes graus de atenuação, o que pode ser visto na variância demonstrada em cada figura. Comparando todos os estimadores, o EKF demonstrou a melhor performance baseado na atenuação do ruído. A variância do ruído foi atenuada em 75% na concentração e 55% na temperatura. Na Tabela 4, as porcentagens de atenuação, relacionadas com as variáveis medidas são mostradas. É importante salientar que existe uma relação entre a não linearidade do modelo (em diferentes pontos de operação) com a qualidade dos valores reconciliados em cada variável. Por isto uma relação entre o grau de atenuação e o ponto de operação do sistema. Os estimadores que apresentaram fortemente este comportamento são: EKF, CEKF, CtEKF e MHE. Os estimadores MDEKF e DEKF mostraram-se estáveis, apresentando uma pequena modificação nas variâncias dos ruídos atenuados para as diferentes regiões. Isto se deve ao fato da predição da matriz

de covariância do erro ser feita de maneira discreta nestas duas formulações.

Os testes para os algoritmos de detecção de erros grosseiros foram realizados para o cenário onde um bias de -0.08 foi adicionado em x_1 . O grau de confiança para o teste global foi escolhido como sendo 95% e o valor de bias foi escolhido de modo que esteja fora desta região. O MHE não foi testado devido ao enorme gasto de tempo computacional. A implementação das estratégias de detecção de erros grosseiros mostra que o GLR é o algoritmo mais simples e que consome menos tempo computacional quando comparado ao algoritmo proposto por McBrayer e Edgar (1995). Na Tabela 5, é mostrada uma comparação entre o tempo computacional utilizado para os conjuntos estimador-algoritmo de detecção. O conjunto MDEKF –GLR foi o que apresentou o melhor desempenho.

Tabela 4. Atenuação do ruído (%) para todos os estimadores

Estimador	Atenuação em x_1	Atenuação em x_2
EKF	75.24	55.26
CtEKF	66.42	50.43
CEKF	63.39	1.37
DEKF	45.33	47.96
MDEKF	35.86	47.71
MHE	-107.66	-16.77

Tabela 5. Tempo computacional para os conjuntos (estimador+detector)

Estimador	GLR	McBrayer and Edgar
EKF	57.39	452.95
CtEKF	56.12	448.12
CEKF	70.23	474.71
DEKF	50.41	408.18
MDEKF	50.32	391.93



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

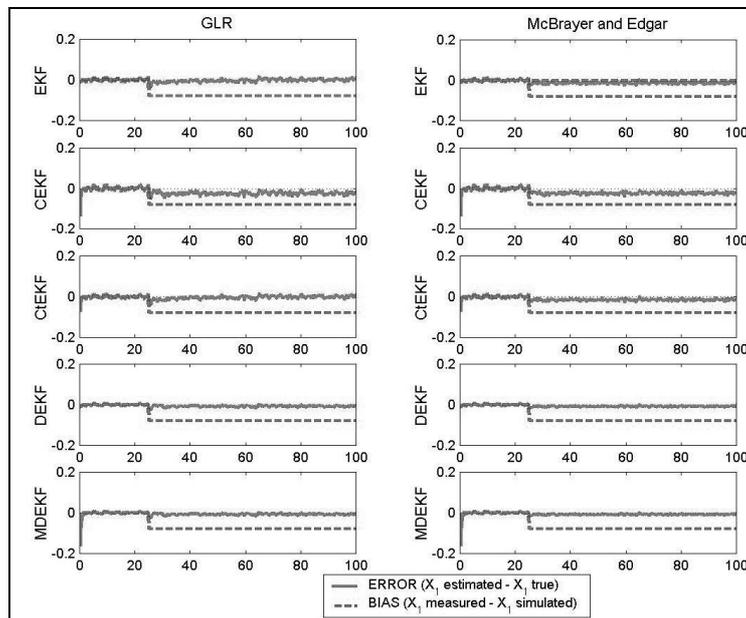


Figura 4. Erros na estimação de x_1

4. Conclusões

- O EKF é a melhor formulação para redução de variância de ruído e o MDEKF apresentou o melhor custo/benefício devido à sua implementação simplificada e a estabilidade em relação ao ponto de operação.

- O MHE não apresentou atenuação do ruído satisfatória e apresenta um altíssimo tempo computacional para ser usado em aplicações em linha.

- O GLR foi a melhor estratégia para detecção de erros grosseiros quando levado em consideração o critério desempenho versus tempo computacional.

5. Bibliografia

- Abu-el-zeet, Z. H., Becerra, V. M., Roberts, P. D., (2002). Combined bias and outlier identification in dynamic data reconciliation. *Comp. and Chem. Engng.*, 26 (2), 921– 935.
- Becerra, M., Roberts D., Griffiths W. (2001). Applying the extended Kalman filter to systems described by nonlinear differential-algebraic equations. *Control Eng. Pract.*, 9, 267-281.
- Liebman, M. J., Edgar, T. F., Lasdon, L. S. (1992). Efficient data reconciliation and estimation for dynamic processes using nonlinear programming techniques. *Comp. and Chem. Engng.*, 16 (10/11), 963–986.
- Limqueco L. C., Kantor J. C. (1990). Nonlinear output feedback control of an exothermic reactor. *Comp. and Chem. Engng* 14, 427
- McBrayer, K., Edgar, T. F. (1995). Bias detection and estimation in dynamic data reconciliation. *Journal of Process Control*, 5 (4), 285–289.
- Narasimhan, S., Mah, R. S. H. (1988). Generalized likelihood ratios for gross error identification in dynamic processes. *AIChE J.*, 34 (8), 1321
- Narashiman S., Jordache C. (2000). Data Reconciliation and Gross Error Detection, *Gulf Publis. Company*.
- Ripps, D. L. (1965). Adjustment of experimental data. *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, 61, 8.
- Salau, N. P., Secchi, A. R., Trierweiler, J. O. (2007). Five formulations of extended kalman filter: Which is the best for D-RTO? *in Proceedings of the ESCAPE 17*, paper T3-486.