

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**Abordagem Sistemática para Construção e
Sintonia de Estimadores de Estados Não-
Linerares**

TESE DE DOUTORADO

Nina Paula Gonçalves Salau

Porto Alegre

2009

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Abordagem Sistemática para Construção e Sintonia de Estimadores de Estados Não- Linerares

Nina Paula Gonçalves Salau

Tese de Doutorado apresentada como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Engenharia.

Área de Concentração: Pesquisa e Desenvolvimento de Processos

Subárea: Projetos, Simulação, Controle e Otimização de Processos Químicos e Biotecnológicos

Orientadores:

Prof. Dr. Argimiro Resende Secchi

Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler

Co-orientador no exterior:

Prof. Dr. Wolfgang Marquardt (RWTH Aachen University, Alemanha)

Porto Alegre

2009

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Tese *Abordagem Sistemática para Construção e Sintonia de Estimadores de Estados Não-Linearares*, elaborada por Nina Paula Gonçalves Salau, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Engenharia.

Comissão Examinadora:



Prof. Dr. José Carlos Costa da Silva Pinto - COPPE/UFRJ



Eng. Dr. Luís Gustavo Soares Longhi - REFAP S.A



Prof. Dr. Marcio Schwaab - UFSM



Eng. Dr. Ricardo Guilherme Duraiski - TriSolutions

*Es ist nicht genug, zu wissen, man muß auch anwenden;
es ist nicht genug, zu wollen, man muß auch tun.*

von Johann Wolfgang von Goethe

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Argimiro R. Secchi e ao Prof. Dr. Jorge O. Trierweiler pela minha excelente formação ao longo destes 7 anos em que trabalhamos juntos.

Ao Prof. Dr. Wolfgang Marquardt pelas direções sugeridas para o meu trabalho de tese e pela oportunidade de realizar parte do meu doutorado no *Lehrstuhl für Prozesstechnik (PT) - Aachener Verfahrenstechnik (AVT)* da *Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule (RWTH) – Aachen*.

Ao Engenheiro Doutor Jens Bausa da BASF SE pela oportunidade de realizar um trabalho de aplicação prática na Alemanha.

Ao Engenheiro Euclides Almeida Neto da PETROBRAS S.A. pelas longas e produtivas discussões a respeito de nossos trabalhos.

À PETROBRAS S.A pelo suporte financeiro durante parte do meu doutorado no Departamento de Engenharia Química (DEQUI) da UFRGS.

Ao *Deutscher Akademischer Austausch Dienst (DAAD)* por financiar o curso de alemão e o período do estágio sanduíche na Alemanha e, principalmente, por ter me proporcionado uma incrível experiência de vida.

Aos colegas e técnicos do AVT-PT e, em especial, Lynn, Arndt, Denis, Reinould, David e Diego pela amizade, pela ajuda com o idioma e pela troca de idéias e experiências técnicas.

Aos colegas e professores do DEQUI por terem participado de alguma forma na minha vida acadêmica. Alguns agradeço pela amizade, outros pelo apoio técnico, mas a todos agradeço pela agradável convivência que proporcionam um maravilhoso ambiente de trabalho.

À minha irmã Lilian e ao meu cunhado Fernando pelo apoio e carinho e, principalmente, por terem colocado em nossas vidas os meus dois lindos sobrinhos, Pedro Henrique e João Vitor.

Aos meus tios Telma e Rubem que me acolheram após o meu retorno este ano à Porto Alegre.

Em especial agradeço aos meus pais, Izolda e Enio, pelo incentivo ao estudo e por terem compreendido a minha ausência durante os 2 anos e 6 meses em que morei na Alemanha. Aos meus pais que dedico este trabalho.

Sumário

Introdução	1
1.1 Importância e aplicabilidade dos estimadores de estados	1
1.1.1 Analisadores virtuais e controle avançado de processos.....	2
1.1.2 Estimação de parâmetros.....	3
1.1.3 Reconciliação de dados	3
1.2 Por que usar estimadores de estados clássicos fundamentados na filtragem de Kalman e formulados como problemas de otimização?	4
1.3 Descrição do problema e das estratégias de solução.....	7
1.4 Estrutura da Tese.....	9
1.4.1 Introdução aos capítulos apresentados na forma de artigos científicos	10
1.4.1 Lista das publicações que compõem esta tese de doutorado.....	12
Referências.....	14
Estimação não-linear: EKF, CEKF e MHE	17
2.1 Filtro de Kalman Linearizado	18
2.2 Filtro de Kalman Estendido	21
2.2.1 Filtro de Kalman Estendido em Tempo Contínuo	23
2.2.2 Filtro de Kalman Estendido Híbrido	23
2.2.3 Filtro de Kalman Estendido em Tempo Discreto.....	24
2.2.4 Filtro de Kalman Estendido com Posto Reduzido	25
2.2.5 Filtro de Kalman estendido via Equação da Matriz de Riccati em Tempo Discreto.....	27
2.2.6 Filtro de Kalman Estendido via Equação da Matriz de Riccati em Tempo Contínuo	28
2.3 Estimação de Horizonte Móvel.....	32
2.3.1 Considerações gerais.....	32
2.3.2 Equacionamento da MHE	34
2.4 Filtro de Kalman Estendido com Restrições.....	36
Referências.....	39
Aspectos práticos da estimação de estados.....	41
3.1 Formulação do problema de estimação de estados	42
3.2 Análise de observabilidade	42
3.2.1 Critério Popov-Bevelic-Hautus (PBH)	43
3.2.2 Algoritmo proposto para seleção do número mínimo de medidas.....	43
3.3 Sintonia das matrizes de covariância	45
3.3.1 Conversão das matrizes de covariância para definições de estados diferentes	45
3.4 Estudo de caso: Reator semi-batelada Williams Otto	47
3.4.1 Formulação de modelo com estados em base mássica.....	48
3.4.2 Formulação de modelo com estados em base de fração mássica.....	49
3.5 Resultados e Discussão	50
3.5.1 Estimação dos estados x	51
3.5.2 Estimação dos estados z	54
3.6 Conclusões	58

Referências.....	59
Applications of state estimators for monitoring and control of bioprocesses.....	59
Introduction.....	64
Applicability of state estimators.....	66
Virtual analyzer and feedback control.....	66
Parameters fitting and update.....	66
Transient data reconciliation.....	67
EKF, MHE, CEKF and CEKF&S.....	68
Extended Kalman Filter.....	68
Moving Horizon Estimator.....	69
Constrained Extended Kalman Filter.....	70
Constrained Extended Kalman Filter and Smoother (CEKF&S).....	71
Computational methods.....	73
Case study.....	73
Results and analyses.....	76
Virtual analyzer and feedback control.....	76
Parameters fitting and update.....	79
Transient data reconciliation.....	83
Conclusions.....	86
Appendix 1 (Implementation of CEKF using MATLAB language).....	88
Appendix 2 (Implementation of the Smoother Procedure of CEKF&S).....	89
References.....	90
Issues on State Covariance Matrix Computation for Nonlinear Systems	91
Introduction.....	96
Formulation and solution of the estimation problem.....	98
Unconstrained EKF formulations.....	99
Moving Horizon Estimator (MHE).....	106
Constrained EKF.....	108
Examples of numerical pitfalls by state covariance matrix computation.....	110
System tending to multiple equilibrium points.....	110
System tending to multiple steady-states and limit cycles.....	120
Conclusions.....	128
Literature Cited.....	130
A new process-noise covariance matrix tuning algorithm for Kalman-based state estimators.....	131
Introduction.....	136
Problem formulation and solution strategies.....	139
Hybrid Extended Kalman Filter (H-EKF).....	139
Systematic approaches to calculate the $\omega(t)$ statistics.....	141
Algorithm for tuning the Q -matrix.....	144
State estimation – first step.....	145
Parameter estimation step.....	145
State estimation – second step.....	145
Direct method: parameter covariance matrix C_p via parameter estimation.....	146

Sensitivity method: parameter covariance matrix C_p via sensitivity integration	146
Case studies	147
Case study 1: Williams-Otto semibatch reactor.....	149
Case study 2: CSTR with output multiplicity	159
Conclusions.....	168
Appendix: Selest algorithm.....	170
Literature Cited	171
Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros	175
Conclusões	175
Capítulo 3	176
Capítulo 4	176
Capítulo 5	177
Capítulo 6	178
Sugestões para trabalhos futuros.....	179
Aplicação prática do algoritmo de sintonia da matriz de covariância do ruído de processo.....	179
Estratégia eficiente de estimação de estados baseada em otimização.....	179
Algoritmo para a seleção automática e estimação dos parâmetros do modelo - SELEST	181

Índice de figuras

Figura 1.1:	Aplicações das técnicas de estimação de estados.	2
Figura 1.2:	Relação entre custo computacional e aumento da exatidão da estimativa obtida pelas formulações: EKF, UKF e Filtro Particulado. Esta relação se aplica para sistema não-lineares ou não-gaussianos (Simon, 2006).	6
Figura 1.3:	Fontes de informação para a estimação de estados.	7
Figura 2.1:	Estimação e controle da realimentação dos estados.	17
Figura 2.2:	Trajectoria de referência e trajetória real para o LKF (Crain Ii, 2002).	21
Figura 2.3:	Trajectoria de referência e trajetória real para o EKF (Crain Ii, 2002).	21
Figura 2.4:	Estimação de estados com o filtro de Kalman estendido.	23
Figura 2.5:	Aproximação de posto um $P_{1,k k-1}$ de uma matriz de covariância $P_{k k-1}$ com dimensão 2x2.	26
Figura 2.6:	Esquema do estimador de horizonte móvel.	32
Figura 2.7:	Diagrama da estratégia de atualização para a transferência de informação no tempo posterior (Rao <i>et al.</i> , 2001).	33
Figura 2.8:	Diagrama da estratégia de suavização para a transferência de informação no tempo posterior (Rao <i>et al.</i> , 2001).	33
Figura 3.1:	Esquema do processo do reator Williams-Otto.	48
Figura 3.2:	Desempenho do EKF para na filtragem dos estados medidos considerando a formulação de modelo com estados em base mássica.	53
Figura 3.3:	Desempenho do EKF para na estimação dos estados não-medidos e do parâmetro E_I considerando a formulação de modelo com estados em base mássica.	54
Figura 3.4:	Desempenho do EKF para na filtragem dos estados medidos considerando a formulação de modelo com estados em base de fração mássica.	57
Figura 3.5:	Desempenho do EKF para na estimação dos estados não-medidos e do parâmetro E_I considerando a formulação de modelo com estados em base de fração mássica.	57

Capítulo 4

Figure 1:	Generic state estimator.	65
Figure 2:	Application of state estimation techniques.	67
Figure 3:	Illustrating the error covariance for forward filtering, backward filtering, and smoothing ¹⁸	72
Figure 4:	Jöbses' model dynamic simulation ²³	75
Figure 5:	CEKF performance for feedback control: (a) manipulated variables, (b) measured controlled variable, (c) estimated states.	79
Figure 6:	Comparison between EKF, CEKF and MHE ($N = 2$) performances for parameter estimation: (a) manipulated variables, (b) measured controlled variable (filtered measured state) and (c) estimated states.	82
Figure 7:	Comparison between EKF, CEKF and MHE ($N = 2$) performances for transient data reconciliation: estimated states.	84

Figure 8: Comparison between CEKF&S performances using three different horizon sizes for transient data reconciliation: estimated states until $t = 8$ h.....	85
Figure 9: Comparison between CEKF&S and MHE performances using a horizon size of $N = 2$: estimated states until $t = 8$ h.	86

Capítulo 5

Figure 1. Comparison between the performances of DEKF with and without a noise measurement perturbation of $0.754 atm$ at $t=0.5 min$: (a) until final batch time and (b) until $t=1 min$	114
Figure 2. Comparison between DEKF, EKF-CRE and RREKF performances for a system tending to multiple equilibrium points.....	115
Figure 3. Comparison between the condition number of DEKF and EKF-CRE state covariance matrices for a system tending to multiple equilibrium points.	116
Figure 4. Comparison between clipped DEKF and CEKF performances for a system tending to multiple equilibrium points until $t=15 min$	118
Figure 5. Comparison between the distribution of v_k for (a) clipped DEKF (non-Gaussian) and (b) CEKF (Gaussian).....	119
Figure 6. Comparison between CEKF and MHE ($N=2$) performances for a system tending to multiple equilibrium points until $t=15 min$	119
Figure 7. Bifurcation diagram of CSTR with two Hopf bifurcation points and five steady-states: (—) stable steady-state, (- - -) unstable steady-state, (■) Hopf bifurcation.	122
Figure 8. Comparison between DEKF, EKF-CRE and RREKF performances for a system tending to multiple steady-states.....	124
Figure 9. Comparison between the condition number of DEKF and EKF-CRE state covariance matrices for a system tending to multiple steady-states.	125
Figure 10. Comparison between clipped DEKF and CEKF performances for a system tending to multiple steady-states until $t=2$	127
Figure 11. Comparison between CEKF, MHE using DRE ($N=2$) and MHE ($N=2$) with CRE performances for a system tending to multiple steady-states until $t=2$	127

Capítulo 6

Figure 1. Case Study 1 - EKF with p_{nom} and a constant-value and diagonal matrix Q (Q_d) (a) filtered measured states and (b) estimated states.	154
Figure 2. Case Study 1 - First iteration of the algorithm for tuning the Q -matrix. EKF with a time-varying and non-diagonal matrix Q obtained by the proposed methods - direct (Q_{dm}) and sensitivity (Q_{sm}); and by the literature methods - random variation (Q_{rv}) and Monte Carlo (Q_{MC}): (a) filtered measured states and (b) estimated states.	156
Figure 3. Case Study 1 - Second iteration of the algorithm for tuning the Q -matrix: estimated states for the EKF with p_{est} and a time-varying and non-diagonal matrix Q obtained by the direct (Q_{dm}) and the sensitivity (Q_{sm}) methods.....	158
Figure 4. Bifurcation diagram of CSTR with two Hopf bifurcation points and five steady states: (—) stable steady state, (- - -) unstable steady state, (■) Hopf bifurcation.	160

Figure 5. Case Study 2 - EKF with p_{nom} and a constant-value and diagonal matrix Q (Q_d): (a) filtered measured states and (b) estimated state.	163
Figure 6. Case Study 2 - First iteration of the algorithm for tuning the Q -matrix: EKF with p_{est} and a time-varying and non-diagonal matrix Q obtained by the proposed methods - direct (Q_{dm}) and sensitivity (Q_{sm}); and by the literature method - linear sensitivity method (Q_{ls}): (a) filtered measured states and (b) estimated state.	165
Figure 7. Case Study 2 – Successive iterations of the algorithm for tuning the Q -matrix: estimated states for the EKF with p_{est} and a time-varying and non-diagonal matrix Q , obtained by the sensitivity method (Q_{sm}) after eight iterations of the Q -matrix tuning algorithm.	168
Figure 8. SELEST Algorithm structure.	171

Índice de tabelas

Tabela 2.1: Equações que compõem as etapas de transição e de atualização - CtEKF e HEKF.	29
Tabela 2.2: Equações que compõem as etapas de transição e de atualização - DEKF e RREKF.	30
Tabela 2.3: Equações que compõem as etapas de transição e de atualização - EKF-CRE e EKF-DRE.	31
Tabela 2.4: Equações que compõem a etapa de atualização - MHE, CEKF-SQP e CEKF-QP.	38
Tabela 3.1: Parâmetros do modelo do reator semi-batelada Williams-Otto.	50

Capítulo 4

Table 1: Jöbses' model parameters	75
Table 2: Filters Performance for Parameter Estimation - ITAE Values	82
Table 3: Filters Performance for Data Reconciliation - ITAE Values	86

Capítulo 5

Table 1. Batch Reactor Equilibrium Points, No Measurement or Process Noise	112
Table 2. Dimensionless Parameters of the CSTR ¹⁹	121
Table 3. CSTR Model Parameters Values ¹⁹	122

Capítulo 6

Table 1. Model Parameters of Williams-Otto Semibatch Reactor	151
Table 2. Uncertain Parameters of Williams-Otto Semibatch Reactor	152
Table 3. Parameters Estimated by SELEST Algorithm for the Williams-Otto Semibatch Reactor	157
Table 4. CSTR Full Model Parameters Values ¹⁹	160
Table 5. Uncertain Parameters of CSTR	161
Table 6. Parameters Estimated by the SELEST Algorithm in Successive Iterations of the Algorithm for Tuning the Q -Matrix for the CSTR	167

Abreviações

CEKF	Filtro de Kalman Estendido com Restrições (<i>Constrained Extended Kalman Filter</i>)
CEKF&S	Filtro & Suavizador de Kalman Estendido com Restrições (<i>Constrained Extended Kalman Filter & Smoother</i>)
CRE	Equação da matriz de Riccati em tempo contínuo (<i>Continuous-Time Riccati Equation</i>)
CtEKF	Filtro de Kalman estendido em tempo contínuo (<i>Continuous-Time Extended Kalman Filter</i>)
DEKF	Filtro de Kalman estendido em tempo discreto (<i>Discrete-Time Extended Kalman Filter</i>)
DRE	Equação da matriz de Riccati em tempo discreto (<i>Discrete-Time Riccati Equation</i>)
D-RTO	Otimização dinâmica em tempo real (<i>Dynamic Real-Time Optimization</i>)
EKF	Filtro de Kalman estendido (<i>Extended Kalman Filter</i>)
EKF-CRE	Filtro de Kalman estendido via equação da matriz de Riccati em tempo contínuo (<i>Extended Kalman Filter via Continuous-Time Riccati Equation</i>)
EKF-DRE	Filtro de Kalman estendido via equação da matriz de Riccati em tempo discreto (<i>Extended Kalman Filter via Discrete-Time Riccati Equation</i>)
HEKF	Filtro de Kalman estendido híbrido (<i>Hybrid Extended Kalman Filter</i>)
KF	Filtro de Kalman (<i>Kalman Filter</i>)
LKF	Filtro de Kalman linearizado (<i>Linearized Kalman Filter</i>)
MHE	Estimação (estimador) de horizonte móvel (<i>Moving Horizon Estimation (Estimator)</i>)
MPC	Controle preditivo baseado em modelo (<i>Model Predictive Control</i>)
NMPC	Controle preditivo baseado em modelo não-linear (<i>Nonlinear Model Predictive Control</i>)
PF	Filtro particulado (<i>Particle Filter</i>)
PHB	Popov-Bevelic-Hautus
QP	Programação quadrática (<i>Quadratic Programming</i>)
RREKF	Filtro de Kalman estendido com posto reduzido (<i>Reduced Rank Extended Kalman Filter</i>)
RTS	Rauch-Tugh-Striebel
SQP	Programação quadrática sequencial (<i>Sequential Quadratic Programming</i>)
UKF	Filtro de Kalman <i>unscented</i> (<i>Unscented Kalman Filter</i>)

Notação e Simbologia

Símbolos Maiúsculos

$E []$	Operador esperança ou valor esperado
F	Jacobiana de f em relação aos estados
H	Jacobiana de h em relação aos estados
I	Matriz Identidade
K	Ganho de Kalman
N	Tamanho (comprimento) do horizonte de tempo
P	Matriz de covariância dos estados
Q	Matriz de covariância do ruído de processo
R	Matriz de covariância do ruído de medida
S	Matriz dos coeficientes do problema de otimização quadrática
V	Matriz de auto-vetores (cada coluna corresponde a um auto-valor)

Símbolos Minúsculos

d	Coefficiente linear do problema de otimização quadrática
f	Função de transição do estado (
h	Função que relaciona os estados com as medições (saídas)
k	Representação de condição temporal para sistemas com dinâmicas em tempo discreto
m	Número de medidas
n	Número de estados
nl	Número de modelos lineares
p	Vetor de parâmetros
t	Vetor de tempo
t_f	Tempo final
t_s	Tempo de amostragem
u	Vetor de entradas
x	Vetor de estados
y	Vetor de variáveis medidas (saídas)
z	Vetor de estados fortemente correlacionados

Símbolos Gregos

Δ	Intervalo
Θ	Graus de liberdade do problema de otimização quadrática
Λ	Matriz diagonal dos auto-valores
Ψ	Função objetivo dos estimadores formulados como problemas de otimização
λ	Vetor de auto-valores
v	Vetor do ruído de medição
v	Vetor de auto-vetores
φ	Matriz de transição do estado para o estado no tempo t_k
ω	Vetor do ruído do processo

Resumo

Este trabalho apresenta metodologias para a construção e a sintonia de estimadores de estados não-lineares visando aplicações práticas. O funcionamento de um estimador de estados não-linear está calcado em quatro etapas básicas: (a) sintonia; (b) predição; (c) atualização da matriz de covariância de estados; (d) filtragem e suavização dos estados. As principais contribuições deste trabalho para cada uma destas etapas podem ser resumidas como segue:

- (a) **Sintonia.** A sintonia adequada da matriz de covariância do ruído de processos é fundamental na aplicação dos estimadores de estado com modelos sujeitos a incertezas paramétricas e estruturais. Sendo assim, foi proposto um novo algoritmo para a sintonia desta matriz que considera dois novos métodos para a determinação da matriz de covariância dos parâmetros. Este algoritmo melhorou significativamente a precisão da estimação dos estados na presença dessas incertezas, com potencialidade para ser usado na atualização de modelos em linha em práticas industriais.
- (b) **Predição.** Uma das etapas mais importantes para a aplicação do estimador de estados é a formulação dos modelos usados. Desta forma, foi mostrado como a formulação do modelo a ser usada em um estimador de estados pode impactar na observabilidade do sistema e na sintonia das matrizes de covariância. Também são apresentadas as principais recomendações para formular um bom modelo.
- (c) **Atualização da matriz de covariância dos estados.** A robustez numérica das matrizes de covariância dos estados usadas em estimadores de estados sem e com restrições é ilustrada através de dois exemplos da engenharia química que apresentam multiplicidade de soluções. Mostrou-se que a melhor forma de atualizar os estados consiste na resolução de um problema de otimização sujeito a restrições onde as estimativas fisicamente inviáveis dos estados são evitadas. Este também preserva a gaussianidade dos ruídos evitando que estes sejam mal distribuídos.
- (d) **Filtragem e suavização dos estados.** Entre as formulações estudadas, observou-se também que a melhor relação entre a acuracidade das estimativas e a viabilidade de aplicação prática é obtida com a formulação do filtro de Kalman estendido sujeita a restrições (denominada Constrained Extended Kalman Filter - CEKF), uma vez que esta demanda menor esforço computacional que a estimação de horizonte móvel, apresentando um desempenho comparável exceto no caso de estimativas ruins da condição inicial dos estados. Como uma solução alternativa eficiente para a estimação de horizonte móvel neste último caso, foi proposto um novo estimador baseado na inclusão de uma estratégia de suavização na formulação do CEKF, referenciado como CEKF & Smoother (CEKF&S).

Palavras-chave: estimação não-linear, projeto de estimador de estado, matrizes de covariância, atualização de modelos.

Abstract

This work presents approaches to building and tuning nonlinear state estimators aiming practical applications. The implementation of a nonlinear state estimator is supported by four basic steps: (a) tuning; (b) forecast; (c) state covariance matrix update; (d) states filtering and smoothing. The main contributions of this work for each one of these stages can be summarized as follows:

- (a) ***Tuning.*** An appropriate choice of the process-noise covariance matrix is crucial in applying state estimators with models subjected to parametric and structural uncertainties. Thus, a new process-noise covariance matrix tuning algorithm is presented in this work which incorporates two new methods for the parameter covariance matrix computation. The algorithm has improved significantly the state estimation accuracy when the presence of such uncertainties, with potential to be applied in on-line model update in industrial practice.
- (b) ***Forecast.*** One of the most important stages in applying state estimators is the used model formulation. In this way, it has been shown that the model formulation to be used in state estimator can impact on the system observability and noise-covariance matrices tuning. In this work it is also presented the main recommendations to formulate an appropriated model.
- (c) ***State covariance matrix update.*** The numerical robustness of the state covariance matrices used in unconstrained and constrained state estimators is illustrated by two chemical engineering examples tending to multiple solutions. It has been shown that the best technique to update the states consists in solving an optimization problem subjected to constraints, since it prevents from physically unfeasible states. It also preserves the noise gaussianity preventing from bad noise distribution.
- (d) ***States filtering and smoothing.*** Among the studied formulations, it was also noticed that the better relationship between performance and practical application is obtained with an extended Kalman filter formulation subjected to constraints (called Constrained Extended Kalman Filter - CEKF) because it requires small computational effort than MHE with comparable performance, except in case of poor guesses of the initial state. As an efficient solution for moving horizon estimation in the last case, it was proposed a new estimator based on the addition of a smoother strategy into the CEKF formulation, referred as CEKF & Smoother (CEKF&S).

Keywords: nonlinear estimation, state estimator design, covariance matrices, model updating.

Capítulo 1

Introdução

1.1 Importância e aplicabilidade dos estimadores de estados

As mudanças frequentes nas condições de mercado “forçam” as indústrias químicas a utilizarem melhor as suas capacidades. As operações do processo precisam estar estritamente próximas às demandas do mercado para melhorar a sua produtividade, uma vez que só se consegue bons preços em determinado produto quando este é solicitado pelo mercado. A necessidade de uma operação mais ágil e lucrativa da planta industrial sob condições operacionais flexíveis exige a otimização econômica integrada à operação da planta.

Backx *et al.* (1998) analisaram o estado-da-arte das técnicas de controle preditivo baseado em modelo e da otimização dinâmica em tempo real baseada em modelo, empregados na década passada, para resolver problemas relacionados com a operação dinâmica intencional da planta de acordo com demandas de mercado constantemente variáveis. Os autores também enfatizam a consistência entre o controle preditivo e a otimização baseados em modelos como um ponto crucial para o alto desempenho operacional da planta e apontam a estimação de estados como uma tarefa a ser incluída para que se atinja este objetivo.

Como na maioria dos problemas práticos é impossível se obter todos os estados do processo apenas através das medições, a função do estimador de estados é combinar as medições disponíveis com um modelo do sistema para inferir o vetor de estados, conforme ilustrado na Figura 1.1, preenchendo desta forma as lacunas de informação necessárias para se fazer o acompanhamento mais eficiente e avançado do processo.

Na Figura 1.1 também são ilustradas as principais aplicações das técnicas de estimação de estados que são discutidas abaixo.

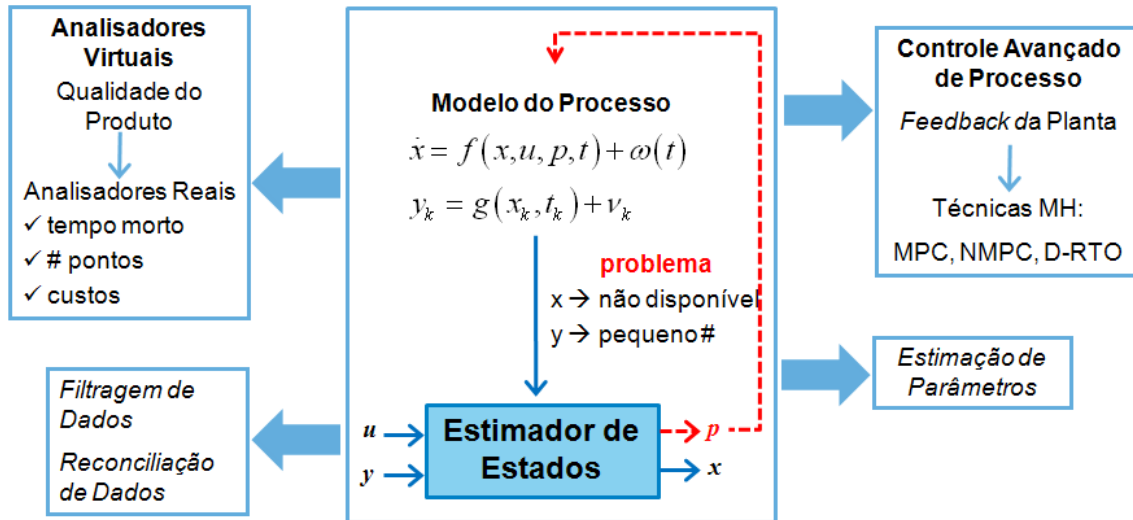


Figura 1.1: Aplicações das técnicas de estimação de estados.

1.1.1 Analísadores virtuais e controle avançado de processos

Para computar trajetórias de processo economicamente ótimas e com base em um modelo não-linear rigoroso do processo, as variáveis de estado no começo do horizonte de predição devem ser conhecidas. Entretanto, devido às limitações tanto tecnológicas quanto financeiras, nem todos os estados são medidos em aplicações práticas e, por isso, o estimador de estados é visto como uma peça fundamental no controle avançado de processos (Engell, 2007).

A monitoração e o controle de processos necessitam de informação confiável em tempo real sobre as variáveis de estado para assegurar a operação adequada da planta. O controlador calcula as ações de controle necessárias com base nos índices de qualidade do produto produzido na planta como, por exemplo, a viscosidade, o índice de fluidez, a densidade, a composição e a distribuição de massas molares para os polímeros. As medidas desses índices são raramente disponíveis em linha, sendo obtidas normalmente através de análises de amostras laboratoriais (poucos pontos). Estas medidas laboratoriais são obtidas esporadicamente com um atraso (tempo morto) substancial entre os tempos de amostragem (Soroush, 1998). Portanto, estas medidas devem ser estimadas ou inferidas mais frequentemente de modo a serem aplicáveis no esquema de controle. O estimador de estado pode neste caso ser usado como um analisador virtual, fornecendo informações em linha sobre as variáveis de estado não-medidas. Isto possibilita o controle retroalimentado das variáveis de estado do processo, permitindo a operação robusta do sistema de controle em várias taxas amostrais da qualidade do produto.

1.1.2 Estimação de parâmetros

Outro pré-requisito importante para o controle em tempo real baseado na otimização de modelos dinâmicos não-lineares de processos envolve os modelos aproximados usados na otimização dinâmica em tempo real (D-RTO, do inglês *Dynamic Real Time Optimization*) e no controle preditivo baseado em modelo (MPC, do inglês *Model Predictive Control*), uma vez que estes modelos requerem freqüentes atualizações. Abordagens de otimização com diferentes fidelidades de modelo têm sido estudadas, visto que a habilidade de um sistema de otimização em tempo real (RTO) para perseguir o ótimo móvel necessita do suporte de um modelo de boa qualidade para representar o comportamento da planta (Yip & Marlin, 2004; Zhang & Forbes, 2000). A teoria de estimação de estados também pode ser usada para estimar parâmetros desconhecidos ou incertos de um modelo para aumentar a fidelidade deste. Uma maneira de fazer isto é aumentar o vetor de estados com o vetor de parâmetros constantes e adicionar ao modelo equações diferenciais para os parâmetros estimados (Simon, 2006). Como parâmetros são constantes, o lado direito das correspondentes equações diferenciais recebe um valor nulo. Outra maneira de estimar parâmetros via estimação de estados requer um modelo dinâmico para cada um dos parâmetros desconhecidos a serem estimados, tais como o modelo de passo aleatório (*random walk*) e o modelo de rampa aleatória (*random ramp*). Uma vez escolhidos os parâmetros apropriados, um estimador de estados é usado para estimá-los. Este método tem sido extensamente usado na engenharia química e biológica (Soroush, 1998).

1.1.3 Reconciliação de dados

Os estimadores de estado são também aplicados como uma técnica de reconciliação de dados transientes para o problema de detectar a localização e a magnitude de erros grosseiros. O uso do pré-processamento de dados e de técnicas de reconciliação de dados transientes pode reduzir consideravelmente a inacurácia dos dados de processo devido a erros de medida. Também tem sido mostrado que o desempenho global do MPC melhora consideravelmente quando o dado é primeiramente reconciliado antes de ser alimentado no controlador, principalmente se o controlador preditivo usar um modelo não linear do processo (Abu-El-Zeet *et al.*, 2002b).

Entretanto, medidas imprecisas podem levar a estimativas que violem as leis de conservação usadas no modelo do sistema. Como freqüentemente se espera que as estimativas satisfaçam as leis de conservação, a aplicação direta do estimador de estado pode exigir restrições de desigualdade como, por exemplo, restrições físicas (Rao & Rawlings, 2002).

Rao & Rawlings (2002) compararam o desempenho entre um estimador de estados baseado em otimização com restrições e o tradicional filtro de Kalman estendido (EKF, do inglês *Extended Kalman Filter*) sem restrições no problema de detecção da localização e da magnitude de um vazamento em um processo de tratamento de águas residuais. Sabendo que os valores dos vazamentos e dos volumes dos tanques em um processo serão sempre positivos, os autores mostraram que o estimador de estados baseado em otimização com

restrições foi capaz de melhorar significativamente a qualidade das estimativas dos estados, devido à incorporação deste conhecimento prévio do processo na forma de restrições de desigualdade. De forma distinta, o EKF, por não fazer uso de restrições, apresentou estimativas de baixa qualidade, não sendo capaz de estimar adequadamente as perdas totais devido aos vazamentos.

Neste mesmo trabalho, os autores sugeriram que o modelo de um processo deveria prever todas possibilidades de vazamento. Assim, com um único modelo, diversos cenários poderiam ser discriminados usando as equações de desigualdade. Aplicar o estimador com restrições de desigualdade possibilita que este seja usado no procedimento de detecção de falhas, uma vez que diferentes cenários podem ser analisados para a seleção do cenário mais plausível.

Uma excelente revisão sobre técnicas para detecção de múltiplos erros grosseiros é descrita em Prata, 2009). Neste trabalho, o uso do estimador-M tipo “*descendente*” de Welsch (oriundo da estatística robusta) (Dennis & Welsch, 1976) é recomendado para a solução do problema de reconciliação de dados, pois apresenta melhor desempenho global no tocante à minimização do efeito negativo de valores espúrios em sistemas dinâmicos com restrições não lineares. O autor aponta como desvantagem, a necessidade de utilizar um método de otimização global, determinístico ou não, durante a regressão.

1.2 Por que usar estimadores de estados clássicos fundamentados na filtragem de Kalman e formulados como problemas de otimização?

O principal objetivo desta tese foi elaborar uma abordagem sistemática para construção e sintonia de qualquer estimador de estados não-linear considerando os diferentes tipos de incertezas e limitações intrínsecos a três fontes básicas de informação: medidas disponíveis, um modelo matemático representativo e as estatísticas do ruído (processo e medida).

Entre os estimadores não-lineares, o EKF é o que recebe maior atenção devido à sua simplicidade relativa e efetividade demonstrada em lidar na prática com alguns sistemas não-lineares. Entretanto, diversas armadilhas numéricas podem ocorrer na implementação deste estimador devido à sua inabilidade em incorporar restrições físicas e ao fato considerar modelos linearizados do sistema não-linear original (Rawlings & Bakshi, 2006).

A ausência de restrições na formulação do EKF é citada por vários pesquisadores como motivação para a estimação de horizonte móvel (MHE, do inglês *Moving Horizon Estimation*) (Muske & Rawlings, 1995; Robertson *et al.*, 1996; Rao *et al.*, 2003; Haseltine & Rawlings, 2005). Considerando a mesma sintonia do estimador, o modelo e as medições tais como no EKF, o MHE é capaz de estimar melhor os estados e apresenta maior robustez para estimativas ruins dos estados iniciais. Estes benefícios surgem porque o MHE incorpora

restrições físicas dos estados em um problema de otimização, usa precisamente o modelo não-linear e otimiza sobre uma trajetória de estados e medidas (Haseltine & Rawlings, 2005). Conseqüentemente, o MHE tem se tornado a escolha natural para sistemas que apresentam restrições de igualdade e/ ou desigualdade e dinâmicas não-lineares. A desvantagem desta técnica é a necessidade de resolver um problema de otimização dinâmica não-linear. Deste modo, devido à alta complexidade matemática introduzida pela não-linearidade e ao elevado custo computacional, esta técnica geralmente não é usada na prática.

A formulação do filtro de Kalman estendido com restrições (CEKF, do inglês *Constrained Extended Kalman Filter*) (Gesthuisen *et al.*, 2001) é vista como uma alternativa para os estimadores formulados como problemas de otimização. A vantagem de considerar as restrições dos estados pode ser explorada nesta técnica com uma demanda computacional relativamente baixa que possibilita seu uso em aplicações práticas. Esta técnica consiste basicamente na resolução do problema de otimização da MHE, no qual as equações diferenciais ordinárias não são consideradas. Isto implica na simplificação da complexidade da resolução de um problema de otimização dinâmica não-linear e, conseqüentemente, na redução significativa do custo computacional.

O CEKF também é considerado similar ao EKF, pois, ao contrário do MHE que trabalha com uma trajetória de medidas, considera apenas as medidas de um único instante de tempo. Este fato pode ser visto como uma desvantagem do CEKF frente ao MHE para lidar com as estimativas ruins das condições iniciais dos estados e com os distúrbios do processo. Para compensar esta desvantagem e garantir um bom compromisso entre qualidade da estimação e tempo computacional, um novo estimador baseado na inclusão de uma estratégia de suavização na formulação do CEKF, referenciado como CEKF & Smoother (CEKF&S), é proposto neste trabalho.

Técnicas de estimação de estados tais como o filtro de Kalman *Unscented* (UKF, do inglês *Unscented Kalman Filter*) (Julier *et al.*, 2000; Julier & Uhlmann, 2004b; Julier & Uhlmann, 2004a) e o Filtro Particulado (PF, do inglês *Particle Filter*) (Doucet *et al.*, 2000; Rawlings & Bakshi, 2006) são recentes adições ao estado-da-arte que estão se tornando muito difundidas. Estas técnicas proporcionam maneiras de reduzir os erros de linearização que são inerentes ao EKF. Em um sistema não-linear e não-gaussiano, o EKF pode ser usado para a estimação de estados, porém o UKF e o PF devem gerar melhores resultados ao preço de um adicional esforço computacional, conforme ilustrado na Figura 1.2.

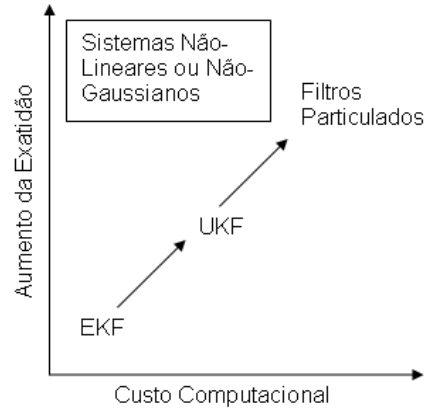


Figura 1.2: Relação entre custo computacional e aumento da exatidão da estimativa obtida pelas formulações: EKF, UKF e Filtro Particulado. Esta relação se aplica para sistema não-lineares ou não-gaussianos (Simon, 2006).

A demanda computacional para resolver o problema de estimação de estados deve causar problemas nas aplicações em linha para processos químicos, especialmente se a taxa de amostragem do estimador for alta. A este fato soma-se que o tempo de processamento computacional do estimador deve ser muito menor que o tempo de amostragem do processo, pois o controlador calcula as ações de controle necessárias com base na informação em tempo real das variáveis de estado em cada tempo de amostragem do processo. Não faz sentido obter uma estimativa muito precisa dos estados se esta informação não puder ser usada em linha para melhorar o desempenho do controlador. Por outro lado, estimadores de estados clássicos fundamentados na filtragem de Kalman e formulados como problemas de otimização, se projetados adequadamente, proporcionam um balanço entre baixo custo computacional e bom desempenho, além de serem viáveis para aplicações em linha.

Embora não tratadas neste trabalho, várias outras técnicas para a estimação de estados têm sido propostas na literatura. Exemplos destas técnicas são as derivadas do clássico observador de Luenberger (Luenberger, 1971), também conhecido como observador proporcional, usado em sistemas lineares. Para o caso não-linear, este observador é conhecido como observador estendido de Luenberger (Quintero-Marmol *et al.*, 1991). De modo a obter uma melhor estimativa dos estados frente a perturbações do sistema, o termo integral foi adicionado a este observador originando o observador proporcional-integral para sistemas lineares (Beale & Shafai, 1989) e não-lineares (Jung *et al.*, 2007).

Cabe salientar também as técnicas de estimação de estados baseadas em sensores virtuais (*soft sensors*) construídos basicamente por três métodos principais (Fortuna *et al.*, 2007): modelagem determinística (modelagem física), estatística multivariada e modelagem de inteligência artificial (redes neurais, lógica *fuzzy* e métodos híbridos).

Outro exemplo é a estimação robusta rigorosa de estados e parâmetros com auxílio de ferramentas de reconciliação de dados (Prata *et al.*, 2006; Prata *et al.*, 2008; Prata *et al.*,

2009). Esta técnica é usada para evitar estimativas errôneas na presença de valores espúrios e também pode ser implementada em tempo real em processos reais (Prata, 2009). Sua concepção é similar ao método MHE, generalizando a forma da função objetivo para poder incluir estimadores robustos.

1.3 Descrição do problema e das estratégias de solução

Como nem todos os estados são medidos em uma aplicação prática e o desempenho global do otimizador e do controlador é diretamente afetado pela qualidade da estimativa do estado atual, a estimação de estados é um ingrediente chave do controle avançado baseado em modelo. Sendo o objetivo principal deste trabalho o desenvolvimento de metodologias para a construção e a sintonia de estimadores de estados não-lineares para aplicações práticas, primeiramente devem-se apontar as fontes de informação que podem ser usadas para esta finalidade, conforme ilustrado na Figura 1.3.

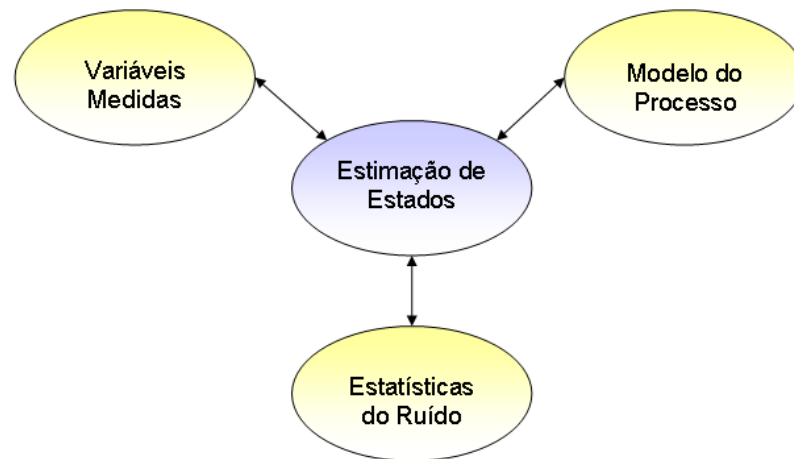


Figura 1.3: Fontes de informação para a estimação de estados.

Entretanto, estas fontes de informação contêm diferentes tipos de incertezas e limitações como descritas a seguir:

- *Variáveis Medidas:* As medidas podem estar contaminadas com erros que são classificados de um modo geral como aleatórios e grosseiros, de modo que as leis de conservação de massa e energia não são obedecidas (Crowe, 1996). Os erros aleatórios são inerentes ao procedimento de medição e também são conhecidos como ruídos (Bagajewicz & Jiang, 1998; Chen & Romagnoli, 1998). Os erros grosseiros são eventos não-aleatórios e não seguem a distribuição estatística do volume de dados. Eles podem ser divididos em duas categorias de desvios: sistemáticos (“*bias*”) e

discrepantes (“*outliers*”). A primeira categoria ocorre quando os instrumentos de medida fornecem valores errôneos consistentemente, nem tão altos, nem tão baixos, e podem ser causados pela instalação ou calibração incorreta dos sistemas de medição. Os desvios discrepantes podem ser considerados como o comportamento anormal dos valores da medição e são causados por falhas temporárias: nos instrumentos de medição, no processo (e.g., vazamentos do processo), nos atuadores (e.g., problemas no fornecimento de ar comprimido para válvulas de controle), distúrbios de elevada magnitude, mas de curta duração, etc. A reconciliação de dados transientes pode reduzir consideravelmente a imprecisão dos dados de medida contaminados por estes dois tipos de desvios (Bagajewicz & Jiang, 1998; Chen & Romagnoli, 1998).

- *Modelo do Processo*: Um projeto adequado de estimadores de estados para o controle avançado exige um modelo matemático, normalmente baseado em primeiros princípios, detalhado e representativo para capturar o comportamento não-linear do processo. Entretanto, o desenvolvimento de um modelo de processo dinâmico e não-linear normalmente exige um alto custo de engenharia para formulação, implementação e validação, o qual só será despendido em práticas industriais se um retorno significativo no investimento for esperado. Para superar esta limitação, Marquardt, 1995) sugere uma sistematização do processo de modelagem para sustentar o projeto do sistema de controle, avaliação e implementação. Como as abordagens de estimação de estados geralmente requerem a linearização de modelos não-lineares, um método de linearização adequado deve ser selecionado para a obtenção de um modelo linear aproximadamente igual ao modelo não-linear. Além disto, os erros de linearização podem causar uma divergência da estimativa do estado dos seus valores verdadeiros.
- *Estatísticas do Ruído*: As estatísticas do ruído de medida são atribuídas à irreprodutibilidade do instrumento de medida e são facilmente acessíveis (Valappil & Georgakis, 2000). Além disso, é um tanto comum assumir a presença de erros aleatórios normalmente distribuídos com média zero e covariância conhecida nos dados de processo (Abu-El-Zeet *et al.*, 2002a; Chen & Romagnoli, 1998). Por outro lado, em problemas reais, as estatísticas do ruído de processo são freqüentemente desconhecidas, não satisfazendo as considerações de distribuição normal e representam principalmente os efeitos das incertezas paramétricas e estruturais (Valappil & Georgakis, 2000).

Desta forma, o projeto adequado de um estimador de estados deve considerar os diferentes tipos de incertezas e limitações das fontes de informação. Além disso, algumas questões em aberto também precisam ser tratadas no problema de estimação de estados:

- i. Como desenvolver modelos matemáticos baseados em primeiros princípios para representar adequadamente o comportamento não-linear do processo e, por meio disso, sustentar o projeto, a avaliação e a implementação do estimador de estados?

- ii. Considerando que é inviável medir todas as variáveis em um processo, devido à limitações financeiras e tecnológicas, como pode ser estabelecido o melhor e o menor número de medidas que, combinadas com um modelo matemático, garantam a observabilidade de um sistema?
- iii. Como as técnicas de estimação de estados podem ser usadas como uma ferramenta para a melhoria operacional de um processo, considerando as aplicações mencionadas neste capítulo de introdução?
- iv. Visto que a MHE trabalha com uma trajetória de medidas ao invés de trabalhar apenas com as medidas de um único instante de tempo, este é mais adequado que o CEKF (MHE com um comprimento de horizonte nulo) para lidar com as estimativas ruins das condições iniciais dos estados e com os distúrbios do processo. Nestas circunstâncias, pode ser possível que o CEKF falhe na tentativa de convergir rapidamente para os estados verdadeiros. Deste modo, como agregar mais informações ao CEKF para que resultados comparáveis à MHE sejam obtidos?
- v. Como evitar “armadilhas” na implementação de um estimador de estados considerando problemas numéricos, a observabilidade de estados, o método de linearização e a atualização da matriz de covariância de estados?
- vi. Como e quando o modelo deve ser atualizado? Qual o conjunto de parâmetros que deve ser atualizado considerando a sua região de confiança e as limitações na janela experimental e a quantidade de dados?
- vii. Visto que um modelo de processo é caracterizado por incertezas estruturais e paramétricas que podem ser variantes no tempo, tais como para processos contínuos e em batelada com dinâmicas de processo variantes no tempo e que operam com uma grande variação das condições de processo, como as estatísticas do ruído de processo podem ser estimadas?

A fim de elaborar uma abordagem sistemática para construção e sintonia de estimadores de estados não-lineares, estas questões serão respondidas neste trabalho. Várias simulações com alguns exemplos da engenharia química ilustram os benefícios destas metodologias para aplicações em linha.

1.4 Estrutura da Tese

Esta tese foi desenvolvida principalmente no GIMSCOP (Grupo de Intensificação, Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos) do Departamento de Engenharia Química (DEQUI) da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS). Parte deste trabalho foi realizada durante o estágio de doutorado no *Lehrstuhl für Prozesstechnik (PT)* da *Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule (RWTH) - Aachen*, sob a orientação do Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Marquardt. O estágio no exterior teve a duração

de 2 anos, compreendendo o período de abril de 2007 a março de 2009, sendo financiado pelo *Deutscher Akademischer Austausch Dienst (DAAD)*.

O trabalho foi estruturado na forma de artigos científicos conforme Resolução Nº 093/2007 de 12/06/2007 da Câmara de Pós-Graduação da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS) que estabelece orientações para fins de publicação e redação de Teses de Doutorado, Dissertações de Mestrado e trabalhos de conclusão de Cursos de Especialização.

A motivação e a importância deste trabalho foram discutidas neste capítulo de introdução. No capítulo 2 são apresentadas as formulações dos estimadores de estado utilizados neste trabalho.

No capítulo 3 são discutidos aspectos práticos da estimação de estados como a formulação do modelo usado no estimador de estados e questões relativas à observabilidade do sistema considerado. As questões **i** e **ii** são respondidas neste capítulo.

As demais questões levantadas serão respondidas nos capítulos 4, 5 e 6, nos quais são apresentados os artigos científicos na forma como foram submetidos a periódicos internacionais.

O capítulo 7 resume as principais contribuições desta tese de doutorado e esquematiza possíveis direções para trabalhos futuros.

O Apêndice apresenta o algoritmo para a seleção automática e estimação dos parâmetros do modelo - SELEST (Secchi *et al.*, 2006), usado no capítulo 6, na forma em que foi publicado nos anais do *International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes - ADCHEM 2006*.

1.4.1 Introdução aos capítulos apresentados na forma de artigos científicos

Capítulo 4: "Application of State Estimators for Monitoring and Control of Bioprocesses."

De modo a motivar o uso dos estimadores de estado como uma ferramenta para a melhoria do desempenho operacional de bioprocessos, as aplicações desta ferramenta, revisadas neste capítulo de introdução, são ilustradas no capítulo 4 através de um biorreator que utiliza a bactéria *Zymomonas mobilis* para a produção de etanol (Jöbses *et al.*, 1986). Com este propósito, três técnicas de estimação de estados foram validadas usando o modelo deste biorreator: Filtro de Kalman Estendido (EKF), Filtro de Kalman Estendido com Restrições (CEKF) e a Estimação de Horizonte Móvel (MHE). A formulação referenciada neste trabalho como CEKF&S (do inglês, *Constrained Extended Kalman Filter & Smoother*)

também foi introduzida neste capítulo. Os resultados obtidos mostram a relevância dos estimadores de estado para bioprocessos. Além disso, observou-se que a melhor relação entre a precisão das estimativas e a viabilidade de aplicação prática é obtida com o CEKF, uma vez que esta formulação demanda menor esforço computacional que a MHE, apresentando desempenho comparável. Também foi mostrado que a formulação CEKF&S proposta pode ser vista como uma solução alternativa eficiente para a MHE no caso de estimativas ruins da condição inicial dos estados.

As questões **iii** e **iv** são respondidas neste capítulo.

Capítulo 5: *"Issues on State Covariance Matrix Computation for Nonlinear Systems."*

A robustez numérica das matrizes de covariância dos estados de três formulações sem restrição e uma formulação com restrição do EKF (CEKF) é discutida no Capítulo 5. Para tanto, estas formulações foram aplicadas em dois exemplos da engenharia química que apresentam multiplicidade de soluções: a) um reator batelada com reações reversíveis (Haseltine & Rawlings, 2005) no qual a relação entre o modelo e as medidas do sistema produz múltiplos estados que satisfazem a condição de equilíbrio e b) um reator CSTR com reações exotérmicas irreversíveis e balanço de energia da camisa de resfriamento (Torres & Tlacuahuac, 2000) no qual o comportamento não-linear inclui múltiplos estados estacionários e ciclos limites. Mesmo que as formulações do EKF sem restrição sejam constringidas por uma estratégia de corte (*clipping*) que evita estados indesejáveis, os resultados mostraram que o CEKF é, em geral, a melhor escolha entre as formulações do EKF para tais estudos de casos. Ao contrário da formulação do EKF com estratégia de corte (*clipped EKF*), o CEKF incorpora as restrições em um problema de otimização que minimiza o ruído em termos de mínimos quadrados, preservando a sua gaussianidade e evitando que este seja mal distribuído. Os resultados também mostraram que, embora a MHE forneça maior robustez para estimativas ruins dos estados iniciais, convergindo mais rapidamente para os estados reais, esta formulação não é justificada para os estudos de caso em questão devido ao elevado custo computacional.

A questão **v** é respondida neste capítulo.

Capítulo 6: *"A New Process-Noise Covariance Matrix Tuning Algorithm for Kalman-Based State Estimators."*

Um novo algoritmo para a sintonia da matriz de covariância do ruído de processo é apresentado neste capítulo. Este algoritmo tem por objetivo a atualização em linha do modelo do processo e consiste de duas etapas de estimação de estados interligadas por uma etapa de estimação de parâmetros. Adicionalmente, incorpora a aproximação de linearização proposta por Valappil & Georgakis, 1999; 2000) com dois métodos para a determinação da matriz de

covariância dos parâmetros. No método direto, a matriz de covariância dos parâmetros é calculada durante a etapa de estimação de parâmetros com o algoritmo SELEST (Secchi *et al.*, 2006) (Apêndice), enquanto no método da sensibilidade, a matriz de covariância dos parâmetros é obtida através de uma matriz de sensibilidade variante no tempo. O algoritmo proposto foi implementado em dois estudos de caso distintos: um reator semi-batelada (Forbes, 1994) e um reator CSTR com multiplicidade de soluções (Torres & Tlacuahuac, 2000). Os resultados obtidos demonstraram que os métodos propostos melhoram significativamente o desempenho de um filtro de Kalman estendido quando comparados com: a) o caso de uma matriz de covariância de processo constante e diagonal na presença de incertezas paramétricas constantes, b) o caso em que o modelo implementado no filtro de Kalman estendido é estruturalmente diferente do modelo da planta (simulada) e c) os métodos da literatura revisados neste capítulo.

As questões **vi** e **vii** são respondidas neste capítulo.

1.4.1 Lista das publicações que compõem esta tese de doutorado

Capítulo 4

SALAU, N. P. G.; DIEHL, F. C.; TRIERWEILER, J. O., SECCHI, A. R. Application of State Estimators for Monitoring and Control of Bioprocesses. *Submitted to Journal of Chemical Technology and Biotechnology*.

Uma versão simplificada deste artigo está publicada na página do VIII OKTOBERFÓRUM (<http://www.enq.ufrgs.br/oktoberforum>) - realizado no período de 20 a 22 de outubro em Porto Alegre. A banca avaliadora deste trabalho foi composta pelo Eng. Dr. Luís Gustavo Longhi (REFAP S.A) e pelo Eng. Dr. Rodrigo Iván Goytia Mejia (PPGEQ-UFRGS).

Capítulo 5

SALAU, N. P. G.; TRIERWEILER, J. O., SECCHI, A. R. Issues on State Covariance Matrix Computation for Nonlinear Systems. *Submitted to Industrial & Engineering Chemistry Research*.

Uma versão simplificada deste artigo está publicada nos anais do *10th International Symposium on Process Systems Engineering - PSE 2009* - realizado no período de 16 a 20 de agosto em Salvador. Este trabalho foi selecionado para apresentação oral neste evento.

Capítulo 6

SALAU, N. P. G.; SECCHI, A. R., TRIERWEILER, J. O., MARQUARDT, W. A. New Process-Noise Covariance Matrix Tuning Algorithm for Kalman-Based State Estimators. *Submitted to AIChE Journal*.

Uma versão simplificada deste artigo está publicada nos anais do *International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes - ADCHEM 2009* - realizado no período de 12 a 15 de julho em Istambul. Este trabalho foi selecionado para apresentação oral neste evento.

Referências

- ABU-EL-ZEET, Z. H.; BECERRA, V. M.; ROBERTS, P. D. Combined bias and outlier identification in dynamic data reconciliation. *Computers & Chemical Engineering*. v.26, n.6, p.921-935, 2002a.
- ABU-EL-ZEET, Z. H.; ROBERTS, P. D.; BECERRA, V. M. Enhancing model predictive control using dynamic data reconciliation. *Aiche Journal*. v.48, n.2, p.324-333, 2002b.
- BACKX, T.; BOSGRA, O.; MARQUARDT, W. *Towards intentional dynamics in supply chain conscious process operations*. In: FOCAPO 1998, 1998. Snowbird 1998.
- BAGAJEWICZ, M. J.; JIANG, Q. Gross error modeling and detection in plant linear dynamic reconciliation. *Computers & Chemical Engineering*. v.22, n.12, p.1789-1809, 1998.
- BEALE, S.; SHAFAI, B. Robust control system design with a proportional integral observer. *International Journal of Control* v.50, n.1, p.97-111, 1989.
- CHEN, J.; ROMAGNOLI, J. A. A strategy for simultaneous dynamic data reconciliation and outlier detection. *Computers & Chemical Engineering*. v.22, n.4-5, p.559-562, 1998.
- CROWE, C. M. Data reconciliation - Progress and challenges. *Journal of Process Control*. v.6, n.2-3, p.89-98, 1996.
- DENNIS, J. E.; WELSCH, R. E. *Techniques for Nonlinear Least Squares and Robust Regression*. In: Proceedings of American Statistical Association, 1976. Washington, D.C. 1976.
- DOUCET, A.; GODSILL, S.; ANDRIEU, C. On sequential Monte Carlo sampling methods for Bayesian filtering. *Statistics and Computing*. v.10, n.3, p.197-208, 2000.
- ENGELL, S. Feedback control for optimal process operation. *Journal of Process Control*. v.17, n.3, p.203-219, 2007.
- FORBES, J. F. *Model Structure and Adjustable Parameter Selection for Operations Optimizations*. PhD Thesis -. McMaster University, Hamilton, 1994.
- FORTUNA, L.; GRAZIANI, S.; RIZZO, A.; XIBILIA, M. G. *Soft Sensors for Monitoring and Control of Industrial Processes*. London: Springer, 2007.
- GESTHUISEN, R.; KLATT, K.-U.; ENGELL, S. *Optimization-based state estimation - a comparative study for the batch polycondensation of PET*. In: ECC, 2001. Porto. 2001. p.1062-1067.
- HASELTINE, E. L.; RAWLINGS, J. B. Critical evaluation of extended Kalman filtering and moving-horizon estimation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. v.44, n.8, p.2451-2460, 2005.
- JÖBSES, I. M. L.; EGBERTS, G. T. C.; LUYBEN, K. C. A. M.; ROELS, J. A. Fermentation kinetics of *Zymomonas mobilis* at high ethanol concentrations: oscillations in continuous cultures. *Biotechnology and Bioengineering*. v.28, n.6, p.868-877, 1986.
- JULIER, S.; UHLMANN, J.; DURRANT-WHYTE, H. F. A new method for the nonlinear transformation of means and covariances in filters and estimators. *IEEE Transactions on Automatic Control*. v.45, n.3, p.477-482, 2000.

JULIER, S. J.; UHLMANN, J. K. *Unscented filtering and nonlinear estimation*. In: Proceedings of the IEEE, 2004a. Dec, 2004a. p.401-422.

_____. *Unscented filtering and nonlinear estimation*. *Proceedings of the IEEE*. v.92, n.3, p.401-422, 2004b.

JUNG, J.; HUH, K.; SHIM, T. *Dissipative Proportional Integral Observer for a Class of Uncertain Nonlinear Systems*. In: American Control Conference, 2007. New York. 2007.

LUENBERGER, D. G. An Introduction to Observers. *IEEE Transactions on Automatic Control*. v.16, n.6, p.596-602, 1971.

MARQUARDT, W. Towards a Process Modeling Methodology. In: R. BERBER (Ed.). *Methods of Model-Based Control*: Kluwer Academic Publishers, 1995. V.293, Series E, p.3-41.

MUSKE, K. R.; RAWLINGS, J. B. Nonlinear Moving Horizon State Estimation. In: R. BERBER (Ed.). *Methods of Model-Based Control*: Kluwer Academic Publishers, 1995. V.293, Series E, p.349-365.

PRATA, D. M. *Reconciliação Robusta de Dados para Monitoramento em Tempo Real*. Tese de Doutorado – COPPE. UFRJ, Rio de Janeiro, 2009.

PRATA, D. M.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Simultaneous Data Reconciliation and Parameter Estimation in Bulk Polypropylene Polymerizations in Real Time. *Macromolecular Symposia*. v.243, n.1, p.91-103, 2006.

_____. In-Line Monitoring of Bulk Polypropylene Reactors Based on Data Reconciliation Procedures. *Macromolecular Symposia*. v.271, n.1, p.26-37, 2008.

PRATA, D. M.; SCHWAAB, M.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Nonlinear dynamic data reconciliation and parameter estimation through particle swarm optimization: Application for an industrial polypropylene reactor. *Chemical Engineering Science*. v.64, n.18, p.3953-3967, 2009.

QUINTERO-MARMOL, E.; LUYBEN, W. L.; GEORGAKIS, C. Application of an Extended Luenberger Observer to the Control of Multicomponent Batch Distillation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. v.30, p.1870-1880, 1991.

RAO, C. V.; RAWLINGS, J. B. Constrained process monitoring: Moving-horizon approach. *AIChE Journal*. v.48, n.1, p.97-109, 2002.

RAO, C. V.; RAWLINGS, J. B.; MAYNE, D. Q. Constrained state estimation for nonlinear discrete-time systems: Stability and moving horizon approximations. *IEEE Transactions on Automatic Control*. v.48, n.2, p.246-258, 2003.

RAWLINGS, J. B.; BAKSHI, B. R. Particle filtering and moving horizon estimation. *Computers & Chemical Engineering*. v.30, n.10-12, p.1529-1541, 2006.

ROBERTSON, D. G.; LEE, J. H.; RAWLINGS, J. B. A moving horizon-based approach for least-squares estimation. *AIChE Journal*. v.42, n.8, p.2209-2224, 1996.

SECCHI, A. R.; CARDOZO, N. S. M.; ALMEIDA NETO, E.; FINKLER, T. F. *An algorithm for automatic selection and estimation of model parameters*. In: International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes - ADCHEM, 2006. Gramado. 2006.

SIMON, D. *Optimal State Estimation: Kalman, H Infinity, and Nonlinear Approaches*. Hoboken: Wiley-Interscience, 2006.

SOROUGH, M. State and parameter estimations and their applications in process control. *Computers & Chemical Engineering*. v.23, n.2, p.229-245, 1998.

TORRES, A. E. G.; TLACUAHUAC, A. F. Effect of process modeling on the nonlinear behaviour of a CSTR Reactions $A \rightarrow B \rightarrow C$. *Chemical Engineering Journal* v.77, p.153-164, 2000.

VALAPPIL, J.; GEORGAKIS, C. *A Systematic Tuning Approach for the Use of Extended Kalman Filters in Batch Processes*. In: American Control Conference, 1999. Piscataway, USA: IEEE Press. 1999.

_____. Systematic estimation of state noise statistics for extended Kalman filters. *AIChE Journal*. v.46, n.2, p.292-308, 2000.

YIP, W. S.; MARLIN, T. E. The effect of model fidelity on real-time optimization performance. *Computers & Chemical Engineering*. v.28, n.1-2, p.267-280, 2004.

ZHANG, Y.; FORBES, J. F. Extended design cost: a performance criterion for real-time optimization systems. *Computers & Chemical Engineering*. v.24, n.8, p.1829-1841, 2000.

Capítulo 2

Estimação não-linear: EKF, CEKF e MHE

Normalmente nem todos os estados de um modelo dinâmico não-linear são medidos, estes precisam ser estimados ou inferidos de modo que possam ser usados em qualquer estratégia de controle ou otimização. Os estimadores de estados são empregados para estimar estados não-medidos e para filtrar os estados que são medidos. Conseqüentemente, eles são fundamentais para qualquer aplicação de controle avançado de processos. A estrutura básica da estimação e do controle da realimentação dos estados pode ser visto na Figura 2.1.

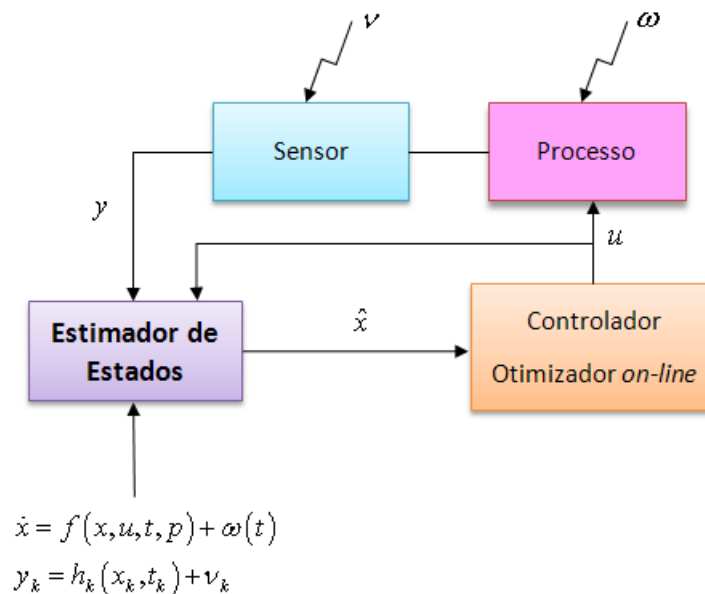


Figura 2.1: Estimação e controle da realimentação dos estados.

A estimação de estados de sistemas lineares, sem restrições e sujeitos a estados e ruídos de medida normalmente distribuídos pode ser realizada através de técnicas maduras e coesas da consolidada teoria da filtragem linear, sendo o filtro de Kalman (KF, do inglês *Kalman Filter*) um estimador ótimo para este propósito. Muitos sistemas físicos, entretanto, exibem dinâmicas não-lineares e possuem estados sujeitos a restrições obrigatórias, tais como concentrações ou pressões que fisicamente possuem valores positivos. Para estes casos, a filtragem de Kalman não pode ser aplicada diretamente (Haseltine & Rawlings, 2005). Desta forma, diversos tipos de estimadores de estados têm sido propostos, sendo o filtro de Kalman estendido (EKF, do inglês *Extended Kalman Filter*) o mais popular devido a sua simplicidade e ao seu baixo custo computacional. Por outro lado, o EKF pode fornecer estimativas não-confiáveis para o caso do sistema apresentar um alto grau de não-linearidade.

Devido ao desenvolvimento de *solvers* eficazes para problemas de otimização não-linear, os estimadores de estados baseados em otimização, tais como a estimação de horizonte móvel (MHE, do inglês *Moving Horizon Estimation*) (Muske & Rawlings, 1995; Robertson *et al.*, 1996; Rao *et al.*, 2001; Rao & Rawlings, 2002; Rao *et al.*, 2003) e o filtro de Kalman estendido com restrições (CEKF, do inglês *Constrained Extended Kalman Filter*) (Gesthuisen *et al.*, 2001), mais simples e computacionalmente menos exigente, tornaram-se alternativas interessantes para aproximações comuns, tais como o EKF, devido à possibilidade de restrições físicas dos estados serem consideradas no problema de otimização. Porém, devido à alta complexidade matemática introduzida pela não-linearidade e ao alto custo computacional, as técnicas de estimação não-linear ótima geralmente não são usadas na prática.

Como o enfoque deste trabalho são os estimadores de estados clássicos e baseados em otimização fundamentados na filtragem de Kalman, as técnicas mencionadas e as suas capacidades são revisadas neste capítulo. As abordagens de alta ordem para a filtragem de Kalman não-linear, tais como a filtragem de Kalman de segunda-ordem, iterativa, baseada em soma e baseada em rede, fornecem maneiras de reduzir os erros de linearização que são inerentes ao EKF, porém ao preço de complexidade e custo computacional maiores (Simon, 2006). Devido à carência literária a respeito de aplicações práticas destas abordagens, estas não serão discutidas neste capítulo.

2.1 Filtro de Kalman Linearizado

No filtro de Kalman linearizado (LKF, do inglês *Linearized Kalman Filter*), as dinâmicas do problema são linearizadas sobre alguma trajetória de referência no espaço-de-estado que não depende de dados de medida (Brown & Hwang, 1997).

Considere que o processo a ser estimado e a relação das medidas associadas devem ser escritos na seguinte forma:

$$\dot{x} = f(x, u, t) + \omega(t) \quad (2.1)$$

$$y = h(x, t) + v(t) \quad (2.2)$$

onde f e h são funções conhecidas, x indica os estados, u indica as entradas determinísticas e y indica o vetor das variáveis medidas. O ruído de processo $\omega(t)$ é considerado como sendo um processo aleatório, gaussiano e branco com média zero e covariância $Q(t)$:

$$E[\omega] = 0 \quad (2.3)$$

$$E[\omega(t)\omega^T(\tau)] = Q(t)\delta(t-\tau) \quad (2.4)$$

O erro de medida $v(t)$ é também considerado como sendo um processo aleatório, gaussiano e branco com média zero e covariância $R(t)$:

$$E[v] = 0 \quad (2.5)$$

$$E[v(t)v^T(\tau)] = R(t)\delta(t-\tau) \quad (2.6)$$

Neste problema, a não-linearidade deve estar presente ou nas dinâmicas do processo ou na relação das medidas (Brown & Hwang, 1997).

Considera-se agora que uma trajetória aproximada $x^*(t)$ deve ser determinada de alguma forma. Esta será referenciada como trajetória de referência e é ilustrada juntamente com a trajetória real na Figura 2.2. A trajetória real $x(t)$ deve ser então escrita como:

$$x(t) = x^*(t) + \Delta x(t) \quad (2.7)$$

As Equações 2.1 e 2.2 tornam-se então:

$$\dot{x}^* + \Delta \dot{x} = f(x^* + \Delta x, u, t) + \omega(t) \quad (2.8)$$

$$y = h(x^* + \Delta x, t) + v(t) \quad (2.9)$$

Considerando que Δx é pequeno e aproximando as funções f e h com expansões em série de Taylor, conservando apenas os termos de primeira ordem, tem-se como resultado:

$$\dot{x}^* + \Delta \dot{x} \approx f(x^*, u, t) + \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{x=x^*} \Delta x + \omega(t) \quad (2.10)$$

$$y \approx h(x^*, t) + \left[\frac{\partial h}{\partial x} \right]_{x=x^*} \Delta x + v(t) \quad (2.11)$$

onde:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots \\ \vdots & & \end{bmatrix}; \quad \frac{\partial h}{\partial x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x_1} & \frac{\partial h_1}{\partial x_2} & \dots \\ \frac{\partial h_2}{\partial x_1} & \frac{\partial h_2}{\partial x_2} & \dots \\ \vdots & & \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

Normalmente a trajetória de referência $x^*(t)$ é escolhida de tal forma que satisfaça a equação diferencial determinística:

$$\dot{x}^* = f(x^*, u, t) \quad (2.13)$$

A substituição da Equação 2.13 na Equação 2.10 resulta no modelo linearizado:

$$\Delta \dot{x} = \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{x=x^*} \Delta x + \omega(t) \quad (\text{dinâmicas linearizadas}) \quad (2.14)$$

$$\left[y - h(x^*, t) \right] = \left[\frac{\partial h}{\partial x} \right]_{x=x^*} \Delta x + v(t) \quad (\text{equação das medidas linearizadas}) \quad (2.15)$$

O estado estimado do LKF é a estimativa da diferença entre o estado real e o estado de referência. A medida no modelo linear é a diferença entre a medida real e a estimada pela trajetória de referência na ausência de ruído. Conseqüentemente, o modo de operação do LKF conduzirá sucessivamente um estado de referência e o estado estimado entre as atualizações da medida. Apenas o estado estimado é atualizado no tempo da atualização da medida. A Figura 2.2 ilustra a relação entre o estado real, o estado de referência e o estado estimado em um LKF estimando uma trajetória bidimensional (Crain Ii, 2002).

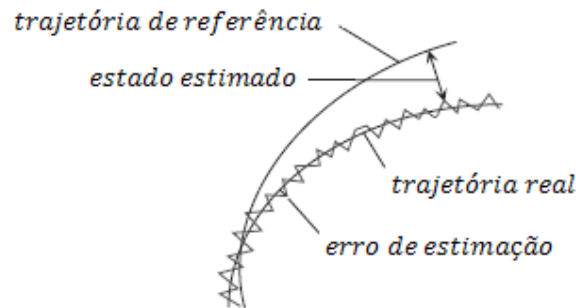


Figura 2.2: Trajetória de referência e trajetória real para o LKF (Crain Ii, 2002).

2.2 Filtro de Kalman Estendido

No EKF, as dinâmicas do problema são linearizadas sobre uma trajetória estimada que é atualizada continuamente com as estimativas dos estados resultantes das medidas (Brown & Hwang, 1997).

A diferença entre o modo de operação do EKF e do LKF é demonstrada através da ilustração da trajetória bidimensional na Figura 2.3. A trajetória de referência do EKF é modificada (ou estimada) com a adição da informação da medida, seguindo a trajetória real (Crain Ii, 2002).

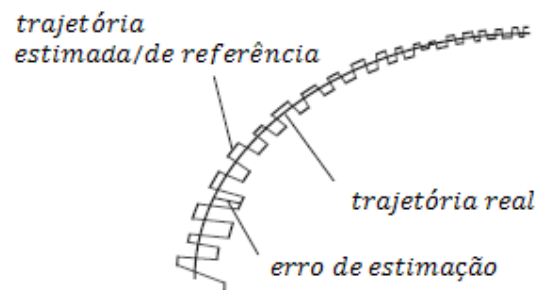


Figura 2.3: Trajetória de referência e trajetória real para o EKF (Crain Ii, 2002).

É importante lembrar que as variáveis de estado básicas no LKF são quantidades incrementais e não quantidades totais. Portanto, o EKF é de maneira geral mais conveniente, pois usa o conhecimento das estimativas totais ao invés das estimativas incrementais. As equações a seguir demonstram como isto é feito e porque é válido fazer desta forma.

Considerando inicialmente a equação de medida linearizada (Equação 2.15):

$$y - h(x^*) = H\Delta x + v \quad (2.16)$$

Nota-se que quando se trabalha com variáveis de estado incrementais, a medida disponibilizada ao EKF é $[y - h(x^*)]$ ao invés da medida total y . A seguir, considera-se a equação atualizada da estimativa incremental no tempo t_k :

$$\Delta \hat{x}_k = \Delta \hat{x}_{k|k-1} + K \left[\underbrace{y_k - h(x_k^*)}_{\substack{\text{medida} \\ \text{incremental}}} - H_k \Delta \hat{x}_{k|k-1} \right] \quad (2.17)$$

Agora, informando o resíduo de medida na Equação 2.17, supõe-se que o termo $h(x^*)$ seja associado com $H_k \Delta \hat{x}_{k|k-1}$ ao invés de y_k . O resíduo de medida pode ser então escrito como:

$$\text{Resíduo de medida} = (y_k - \hat{y}_k) \quad (2.18)$$

Sendo a estimativa da medida apenas a soma de $h(x^*)$ e $H_k \Delta \hat{x}_{k|k-1}$, o resíduo de medida (cf. Equação 2.18) é formado exatamente como seria feito em um filtro de Kalman estendido, ou seja, a diferença entre o ruído de medida e a medida estimada baseada na trajetória corrigida ao invés da nominal.

$$\underbrace{x_k^* + \Delta \hat{x}_k}_{\hat{x}_{k|k}} = \underbrace{x_k^* + \Delta \hat{x}_{k|k-1}}_{\hat{x}_{k|k-1}} + K [y_k - \hat{y}_{k|k-1}] \quad (2.19)$$

$$\hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + K [y_k - \hat{y}_{k|k-1}] \quad (2.20)$$

A Equação 2.20 é, logicamente, a familiar equação da atualização da estimativa linear escrita em termos de quantidades totais ao invés de incrementais. A estimativa *a priori* é corrigida pela adição do resíduo de medida apropriadamente pesado pelo ganho de Kalman K_k .

O EKF lineariza o sistema não-linear e então aplica o filtro de Kalman (estimador de estado linear, ótimo e sem restrição) para obter as estimativas dos estados. A transição dos estados e das covariâncias dos estados é realizada através da integração no próximo instante de tempo. As equações de atualização de medidas são então usadas para estimar as atualizações dos estados e da covariância. As etapas de transição e atualização dos estados podem ser vistas na Figura 2.4.

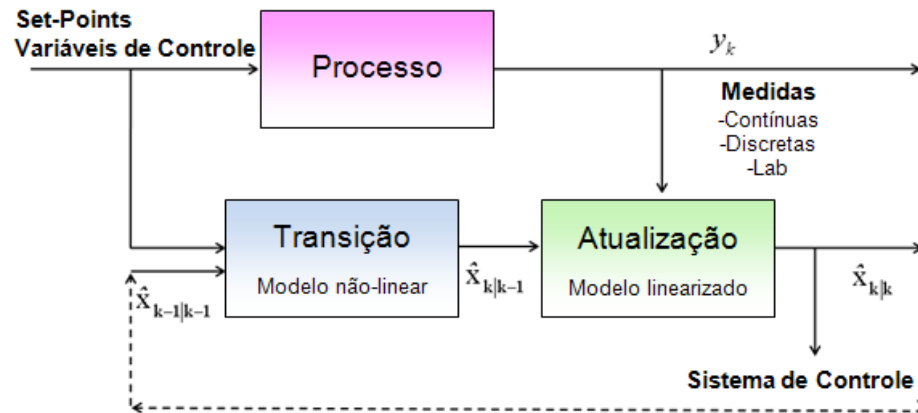


Figura 2.4: Estimação de estados com o filtro de Kalman estendido.

Na sequência serão apresentadas sete formulações diferentes do EKF. O EKF para sistemas em tempo contínuo com medidas em tempo contínuo (CtEKF, do inglês *Continuous-Time Extended Kalman Filter*), o EKF híbrido (HEKF, do inglês *Hybrid Extended Kalman Filter*) e o EKF para sistemas em tempo discreto com medidas em tempo discreto (DEKF, do inglês *Discrete-Time Extended Kalman Filter*) são formulações comumente encontradas na literatura (Brown & Hwang, 1997; Grewal & Andrews, 2001; Simon, 2006). Adicionalmente, serão apresentadas outras três formulações alternativas do EKF: EKF com posto reduzido (RREKF, do inglês *Reduced Rank Extended Kalman Filter*), EKF para sistemas em tempo discreto com medidas em tempo discreto via equação da matriz de Riccati em tempo discreto (EKF-DRE, do inglês *Extended Kalman Filter via Discrete-Time Matrix Riccati Equation*) e o EKF para sistemas em tempo contínuo e medidas em tempo discreto via equação da matriz de Riccati em tempo contínuo (EKF-CRE, do inglês *Extended Kalman Filter via Continuous-Time Matrix Riccati Equation*).

2.2.1 Filtro de Kalman Estendido em Tempo Contínuo

O CtEKF é frequentemente referenciado como filtro Bucy-Kalman estendido devido à colaboração de Richard Bucy com Rudolph Kalman na primeira publicação do filtro de Kalman estendido em tempo contínuo (Kalman & Bucy, 1961). As equações que compõem as etapas de transição e de atualização do CtEKF são descritas na Tabela 2.1.

2.2.2 Filtro de Kalman Estendido Híbrido

Para o caso de dados amostrados de medidas de um processo contínuo, a situação mais comum encontrada na prática, o HEKF é a formulação mais adequada. O H-EKF considera sistemas com dinâmicas em tempo contínuo e observações discretas para a atualização dos

estados, ou seja, medidas em tempo discreto (Simon, 2006). Esta formulação também é freqüentemente referenciada como EKF contínuo-discreto (Jazwinski, 1970).

No HEKF, o ruído de processo $\omega(t)$ é um ruído branco em tempo contínuo com covariância Q . Assume-se o ruído de medida, v_k , como sendo um processo aleatório gaussiano e branco com média zero e covariância R_k . O termo R não deve ser incluído na equação de transição da covariância de estados porque P é integrado entre os tempos das medidas durante os quais não existem medidas. Além disso, as medidas têm covariância infinita ($R=\infty$) entre os tempos das medições, tanto que o termo $P(\tau)H(\tau)^T R(\tau)^{-1} H(\tau)P(\tau)$ presente no lado direito da equação de transição da covariância dos estados do CtEKF é negligenciado. As equações que compõem as etapas de transição e de atualização do HEKF são descritas na Tabela 2.1.

Nota-se que para o HEKF a equação de atualização da covariância dos estados pode ser representada por três expressões (Brown & Hwang, 1997; Grewal & Andrews, 2001; Simon, 2006). A primeira expressão (i.e., Equação A) é denominada de “Forma de Joseph” e apresenta um comportamento numérico melhor que as outras formas (i.e., Equação B e C) em situações numéricas incomuns (Brown & Hwang, 1997). Esta expressão garante que $P_{k|k}$ sempre será positiva definida simétrica, tão logo $P_{k|k-1}$ seja positiva definida simétrica. A terceira expressão para $P_{k|k}$ é computacionalmente mais simples que a primeira, mas esta forma não garante simetria ou definição positiva para $P_{k|k}$ (Simon, 2006).

2.2.3 Filtro de Kalman Estendido em Tempo Discreto

O DEKF considera dinâmicas em tempo discreto e medidas em tempo discreto. Esta situação também é comumente encontrada na prática. Mesmo que as dinâmicas fundamentais do sistema sejam em tempo contínuo, o EKF geralmente precisa ser implementado em um computador digital.

O sistema dinâmico não-linear no tempo contínuo da Equação 2.1 pode ser aproximado pelo sistema dinâmico linear no tempo contínuo representado na forma geral como uma equação diferencial vetorial de primeira ordem (Brown & Hwang, 1997; Grewal & Andrews, 2001; Simon, 2006).

$$\dot{x} = F(t)x(t) + \omega(t) \quad (2.21)$$

O modelo correspondente para um sistema dinâmico linear no tempo discreto pode ser representado na forma geral:

$$x_k = \varphi_{k-1}x_{k-1} + \omega_{k-1} \quad (2.22)$$

onde φ_{k-1} é a matriz de transição do estado para o estado no tempo t_k .

$$\varphi_{k-1} = e^{F(t_k - t_{k-1})} \quad (2.23)$$

Conforme Nicholas, (2005), o método *scaling and squaring* é o método mais difundido usado para computar a matriz exponencial, tanto que é o método implementado no MATLAB. A função *expm* implementada no MATLAB combina o método *scaling and squaring* com a aproximação de Padé para o exponencial da matriz escalonada e é projetada para atingir uma tolerância especificada do erro de aproximação. As equações que compõem as etapas de transição e de atualização do DEKF são descritas na Tabela 2.2.

2.2.4 Filtro de Kalman Estendido com Posto Reduzido

O RREKF é motivado pelos problemas de assimilação de dados, ou seja, observações assimiladoras em modelos numéricos. Esta formulação foi inicialmente aplicada ao problema de assimilação de dados em meteorologia (Verlaan & Heemink, 1997) e posteriormente em oceanografia (ou em ciências geofísicas em geral) (Pham *et al.*, 1998). De forma genérica, a assimilação de dados é vista como um meio de obtenção de um gráfico consistente de um sistema geofísico que combine otimamente todas as informações disponíveis no sistema. Esta informação deve ser composta de todos os tipos de dados, de variação precisa e de distribuição geográfica, e também de informações derivadas do conhecimento teórico, já adquirido do sistema, expresso em termos de leis físicas, determinísticas ou estatísticas e, conseqüentemente, por meio de várias formas de modelo (Pham *et al.*, 1998).

O desenvolvimento do RREKF consiste essencialmente da aproximação da matriz de covariância do erro por uma matriz de posto reduzido e singular, que quantifica na prática a não correção nas direções cujo erro é mais atenuado pelo sistema. Isto é feito pelo cálculo da matriz de covariância em termos de seus auto-valores dominantes. A negligência dos autovalores não-dominantes da matriz de covariância implica na redução da dimensão da região de confiança. Conseqüentemente, as atualizações das medidas não têm efeito nas direções dos autovalores não-dominantes. Se o estado real não partir do atrator, o RREKF é vantajoso uma vez que as atualizações das medidas são omitidas nas direções de maior atração. Além disso, esta modificação do EKF é mais robusta contra uma inicialização inapropriada, conforme citado por Pham *et al.* (1998).

A implementação e as implicações da aproximação da covariância de posto reduzido são brevemente discutidas a seguir. Considere que $V_{P,k}$ compreenda os auto-vetores $v_{P,i}$ de $P_{k|k-1}$ como colunas e que $\Lambda_{P,k}$ compreenda os correspondentes autovalores $\lambda_{P,i}$ na diagonal. Como a matriz de transição da covariância dos estados é simétrica, esta pode ser decomposta como:

$$P_{k|k-1} = V_{P,k} \Lambda_{P,k} V_{P,k}^T = \sum_{i=1}^n \lambda_{P,i} v_{P,i} v_{P,i}^T \quad (2.24)$$

Para $|\lambda_{p,1}| < |\lambda_{p,2}| < \dots < |\lambda_{p,n}|$, a aproximação de posto $q < n$ da matriz de covariância é dada por:

$$P_{q,k|k-1} = \sum_{i=1}^q \lambda_{p,i} \mathbf{v}_{p,i} \mathbf{v}_{p,i}^T \quad (2.25)$$

Geometricamente, a aproximação de posto reduzido é a projeção ortogonal da elipse de covariância ou (hiper-)elipsóide em seus q eixos mais dominantes. A Figura 2.5 ilustra a aproximação de posto um de uma matriz de covariância bidimensional onde:

$$P_{k|k-1} = \begin{bmatrix} 1,67 & 0,93 \\ 0,93 & 2,28 \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

$$P_{1,k|k-1} = \begin{bmatrix} 1,01 & 1,40 \\ 1,40 & 1,93 \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

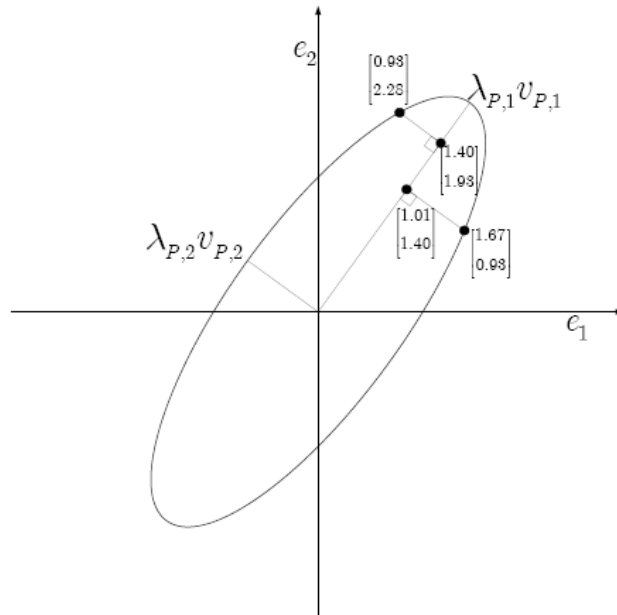


Figura 2.5: Aproximação de posto um $P_{1,k|k-1}$ de uma matriz de covariância $P_{k|k-1}$ com dimensão 2×2 .

As equações que compõem as etapas de transição e de atualização do RREKF quando são descritas na Tabela 2.2. Observa-se que esta formulação é similar ao DEKF, exceto pela modificação proposta na equação de transição da matriz de covariância dos estados.

2.2.5 Filtro de Kalman estendido via Equação da Matriz de Riccati em Tempo Discreto

Nesta seção é revisada uma forma alternativa para o EKF em que a equação da matriz de Riccati em tempo discreto (DRE, do inglês *Discrete Riccati Equation*) é aplicada. Esta formulação, referenciada aqui como EKF-DRE, é computacionalmente atrativa pois a matriz de covariância P dos estados é calculada apenas *a priori* em cada instante de tempo, ou seja, as matrizes de transição e de atualização dos estados são calculadas simultaneamente.

Considera-se a segunda equação da atualização da matriz de covariância dos estados do D-EKF apresentada na Tabela 2.2 e reescrita aqui por conveniência:

$$P_{k|k} = P_{k|k-1} - P_{k|k-1} H_k^T \left[H_k P_{k|k-1} H_k^T + R_k \right]^{-1} H_k P_{k|k-1} \quad (2.28)$$

Se a Equação 2.28 for aplicada considerando que, para os próximos instantes de tempo, a equação da transição da matriz de covariância dos estados também apresentada na Tabela 2.2 pode ser expressa como:

$$P_{k+1|k} = \varphi_k P_{k|k} \varphi_k^T + Q_k \quad (2.29)$$

Ao substituir a Equação 2.28 na Equação 2.29 obtém-se

$$P_{k+1|k} = \varphi_k \left(P_{k|k-1} - P_{k|k-1} H_k^T \left[H_k P_{k|k-1} H_k^T + R_k \right]^{-1} H_k P_{k|k-1} \right) \varphi_k^T + Q_k \quad (2.30)$$

Rearranjando a Equação 2.30 e considerando que $P_{k+1|k+1} = P_{k+1|k}$, a equação resultante para o cálculo da matriz de covariância dos estados é dada por:

$$P_{k+1|k+1} = \varphi_k P_{k|k} \varphi_k^T - \varphi_k P_{k|k} H_k^T \left[H_k P_{k|k} H_k^T + R_k \right]^{-1} H_k P_{k|k} \varphi_k^T + Q_k \quad (2.31)$$

Se a Equação acima for reescrita considerando um instante de tempo passado, obtém-se:

$$P_{k|k} = \varphi_{k-1} P_{k-1|k-1} \varphi_{k-1}^T - \varphi_{k-1} P_{k-1|k-1} H_{k-1}^T \left[H_{k-1} P_{k-1|k-1} H_{k-1}^T + R_{k-1} \right]^{-1} H_{k-1} P_{k-1|k-1} \varphi_{k-1}^T + Q_{k-1} \quad (2.32)$$

A Equação 2.32 é uma versão da equação da matriz de Riccati em tempo discreto. As equações que compõem as etapas de transição e de atualização do EKF-DRE são descritas na Tabela 2.3. Similarmente ao DEKF, o modelo linear discretizado no EKF-DRE é também representado pela matriz de transição φ_{k-1} . Observe na Tabela 2.3 que a equação do ganho de Kalman utiliza $P_{k-1|k-1}$ ao invés de $P_{k|k-1}$, uma vez que este termo não é calculado quando a DRE ou a CRE é usada em uma formulação do EKF.

2.2.6 Filtro de Kalman Estendido via Equação da Matriz de Riccati em Tempo Contínuo

Alternativamente, realizando o mesmo procedimento aplicado para a derivação do EKF-DRE, pode-se obter uma expressão similar para o caso contínuo:

$$P_{k|k} = P_{k-1|k-1} + \int_{k-1}^k \begin{bmatrix} F(\tau)P(\tau) + P(\tau)F(\tau)^T \\ -P(\tau)H(\tau)^T R(\tau)^{-1} H(\tau)P(\tau) + Q(\tau) \end{bmatrix} d\tau \quad (2.33)$$

A equação acima representa a analogia entre a equação da matriz de Riccati em tempo discreto e sua contraparte em tempo contínuo e é referenciada como equação da matriz de Riccati em tempo contínuo (CRE, do inglês *Continuous Riccati Equation*), equivalente à equação de transição da covariância dos estados do CtEKF (Brown & Hwang, 1997; Grewal & Andrews, 2001; Simon, 2006), conforme o equacionamento apresentado na Tabela 2.1. Desta forma, também se pode derivar uma forma alternativa do EKF levando em consideração a CRE. As equações que compõem as etapas de transição e de atualização do EKF-CRE são descritas na Tabela 2.3.

A diferença básica entre o EKF-CRE e o CtEKF está relacionada com a equação do ganho de Kalman. A equação do ganho de Kalman no CtEKF supõe que os valores das medidas permanecem constantes durante todo o intervalo de tempo, o que é adequado apenas para tempos de amostragem pequenos. Adicionalmente, tanto no EKF-CRE quanto no H-EKF são consideradas dinâmicas em tempo discreto e observações discretas para atualização, ou seja, dados amostrados de medida. Conseqüentemente, o EKF-CRE e o HEKF apresentam as mesmas expressões para as etapas de transição e atualização dos estados.

Tabela 2.1: Equações que compõem os estágios de transição e atualização - CtEKF e do HEKF

	CtEKF	HEKF
Sistema Não-Linear	$\dot{x} = f(x, u, t) + \omega(t)$ $y = h(x, t) + v(t)$ $\omega \sim (0, Q)$ $v \sim (0, R)$	$\dot{x} = f(x, u, t) + \omega(t)$ $y_k = h_k(x_k, t_k) + v_k$ $\omega(t) \sim (0, Q)$ $v_k \sim (0, R_k)$
Sistema Linear	$F(t) = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{\hat{x}}$ $H(t) = \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)_{\hat{x}}$	$F(t) = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{\hat{x}}$ $H_k = \left(\frac{\partial h_k}{\partial x} \right)_{\hat{x}_{ k-1}}$
Inicialização do Filtro	$\hat{x}(0) = E[x(0)]$ $P(0) = E[(x(0) - \hat{x}(0))(x(0) - \hat{x}(0))^T]$	$\hat{x}_{00} = E[x(0)]$ $P_{00} = E[(x(0) - \hat{x}_{00})(x(0) - \hat{x}_{00})^T]$
Transição dos Estados	$\hat{x}_{ k-1} = \hat{x}_{ k-1 k-1} + \int_{k-1}^k f(\hat{x}, u, \tau) + K[y - h(\hat{x}, \tau)] d\tau$	$\hat{x}_{ k-1} = \hat{x}_{ k-1 k-1} + \int_{k-1}^k f(\hat{x}, u, \tau) d\tau$
Transição da Covariância dos Estados	$P_{ k-1} = P_{ k-1 k-1} + \int_{k-1}^k \begin{bmatrix} F(\tau)P(\tau) + P(\tau)F(\tau)^T + Q(\tau) \\ -P(\tau)H(\tau)^T R(\tau)^{-1} H(\tau)P(\tau) \end{bmatrix} d\tau$	$P_{ k-1} = P_{ k-1 k-1} + \int_{k-1}^k [F(\tau)P(\tau) + P(\tau)F(\tau)^T + Q(\tau)] d\tau$
Equação do Ganho de Kalman	$K = PH^T R^{-1}$	$K_k = P_{ k-1} H_k^T [H_k P_{ k-1} H_k^T + R_k]^{-1}$
Atualização dos Estados	$\hat{x}_{ k} = \hat{x}_{ k-1}$	$\hat{x}_{ k} = \hat{x}_{ k-1} + K_k [y_k - h(\hat{x}_{ k-1}, t_k)]$
Atualização da Covariância dos Estados	$P_{ k} = P_{ k-1}$	$P_{ k} = [I_n - K_k H_k] P_{ k-1} [I_n - K_k H_k]^T + K_k R_k K_k^T \quad (\text{A})$ $P_{ k} = P_{ k-1} - P_{ k-1} H_k^T [H_k P_{ k-1} H_k^T + R_k]^{-1} H_k P_{ k-1} \quad (\text{B})$ $P_{ k} = [I_n - K_k H_k] P_{ k-1} \quad (\text{C})$

Tabela 2.2: Equações que compõem os estágios de transição e atualização - DEKF e do RREKF

	DEKF	RREKF
Sistema Não-Linear	$\dot{x} = f(x, u, t) + \omega(t)$ $y_k = h_k(x_k, t_k) + v_k$ $\omega(t) \sim (0, Q)$ $v_k \sim (0, R_k)$	
Sistema Linear	$F(t) = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \hat{x}$ $\varphi_{k-1} = e^{F(t_k - t_{k-1})}$ $H_k = \left(\frac{\partial h_k}{\partial x} \right) \hat{x}_{k k-1}$	
Inicialização do Filtro	$\hat{x}_{00} = E[x(0)]$ $P_{00} = E[(x(0) - \hat{x}_{00})(x(0) - \hat{x}_{00})^T]$	
Transição dos Estados	$\hat{x}_{k k-1} = \hat{x}_{k-1 k-1} + \int_{k-1}^k f(\hat{x}, u, \tau) d\tau$	
Transição da Covariância dos Estados		$P_{k k-1} = \varphi_{k-1} P_{k-1 k-1} \varphi_{k-1}^T + Q_{k-1}$ $P_{k k-1} = V_{P,k} \Lambda_{P,k} V_{P,k}^T = \sum_{i=1}^n \lambda_{P,i} v_{P,i} v_{P,i}^T$ $P_{q,k k-1} = \sum_{i=1}^q \lambda_{P,i} v_{P,i} v_{P,i}^T$
Equação do Ganho de Kalman	$K_k = P_{k-1 k-1} H_k^T [H_k P_{k-1 k-1} H_k^T + M_k R_k M_k^T]^{-1}$	
Atualização dos Estados	$\hat{x}_{k k} = \hat{x}_{k k-1} + K_k [y_k - h(\hat{x}_{k k-1}, t_k)]$	
Atualização da Covariância dos Estados	$P_{k k} = [I_n - K_k H_k] P_{k k-1} [I_n - K_k H_k]^T + K_k R_k K_k^T$ $P_{k k} = P_{k k-1} - P_{k k-1} H_k^T [H_k P_{k k-1} H_k^T + R_k]^{-1} H_k P_{k k-1}$ $P_{k k} = [I_n - K_k H_k] P_{k k-1}$	<p>(A)</p> <p>(B)</p> <p>(C)</p>

Tabela 2.3: Equações que compõem os estágios de transição e atualização - EKF-CRE e do EKF-DRE

	EKF-CRE	EKF-DRE
Sistema Não-Linear		$\dot{x} = f(x, u, t) + \omega(t)$ $y_k = h_k(x_k, t_k) + v_k$ $\omega(t) \sim (0, Q)$ $v_k \sim (0, R_k)$
Sistema Linear	$F(t) = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \hat{x}$ $H(t) = \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right) \hat{x}$	$F(t) = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \hat{x}$ $\varphi_{k-1} = e^{F(t_k - t_{k-1})}$ $H_k = \left(\frac{\partial h_k}{\partial x} \right) \hat{x}_{k k-1}$
Inicialização do Filtro	$\hat{x}_{0 0} = E[x(0)]$ $P_{0 0} = E[(x(0) - \hat{x}_{0 0})(x(0) - \hat{x}_{0 0})^T]$	
Transição dos Estados		$\hat{x}_{k k-1} = \hat{x}_{k-1 k-1} + \int_{k-1}^k f(\hat{x}, u, \tau) d\tau$
Transição da Covariância dos Estados	$P_{k k} = P_{k-1 k-1} + \int_{k-1}^k \begin{bmatrix} F(\tau)P(\tau) + P(\tau)F(\tau)^T + Q(\tau) \\ -P(\tau)H(\tau)^T R(\tau)^{-1}H(\tau)P(\tau) \end{bmatrix} d\tau$	$P_{k k} = \varphi_{k,k-1 k-1} P_{k-1 k-1} \varphi_{k,k-1 k-1}^T - \varphi_{k,k-1 k-1} P_{k-1 k-1} H_{k-1}^T [H_k P_{k-1 k-1} H_k^T + R_k]^{-1} H_k P_{k-1 k-1} \varphi_{k,k-1}^T + Q_{k-1}$
Equação do Ganho de Kalman	$K_k = P_{k-1 k-1} H_k^T [H_k P_{k-1 k-1} H_k^T + M_k R_k M_k^T]^{-1}$	
Atualização dos Estados		$\hat{x}_{k k} = \hat{x}_{k-1 k-1} + K_k [y_k - h(\hat{x}_{k-1 k-1}, t_k)]$

2.3 Estimação de Horizonte Móvel

2.3.1 Considerações gerais

A MHE (Muske & Rawlings, 1995; Robertson *et al.*, 1996; Rao *et al.*, 2001; Rao & Rawlings, 2002; Rao *et al.*, 2003) é uma estratégia baseada em otimização para o monitoramento de processos e a estimação de estados. A idéia principal da MHE é proceder com a estimação dos estados fazendo uso das últimas $N+1$ medidas, onde N é o tamanho do horizonte de tempo, conforme esquema mostrado na Figura 2.6.

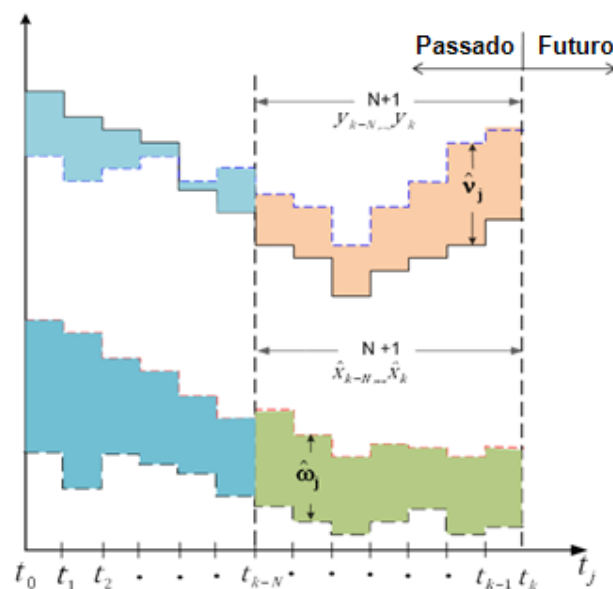


Figura 2.6: Esquema do estimador de horizonte móvel.

A escolha do tamanho do horizonte N é um parâmetro de ajuste na MHE. O desempenho da MHE melhora com o aumento do tamanho do horizonte, embora o custo computacional também aumente com o tamanho do horizonte. Desta forma, é preciso reconciliar estes dois objetivos no momento da escolha do comprimento do horizonte. De um ponto de vista teórico, a MHE é estável desde que o tamanho do horizonte seja maior que a ordem, ou o índice de observabilidade, do sistema (Rao & Rawlings, 2002).

Além da escolha do comprimento do horizonte, outro aspecto importante para a implementação da MHE é o método para incorporar o efeito dos dados passados fora do horizonte de estimação atual (também conhecido como custo marginal). Entretanto, a melhor escolha para este custo permanece como um tema em aberto na pesquisa da MHE (Rawlings

& Bakshi, 2006). Rao *et al.* (2001) propuseram a estimação do custo marginal para sistemas lineares com restrições com o correspondente custo para um sistema linear sem restrições.

Um esquema de filtragem que penaliza desvios da estimativa inicial no horizonte a partir de uma estimativa *a priori*, conforme pode ser visto na Figura 2.7.

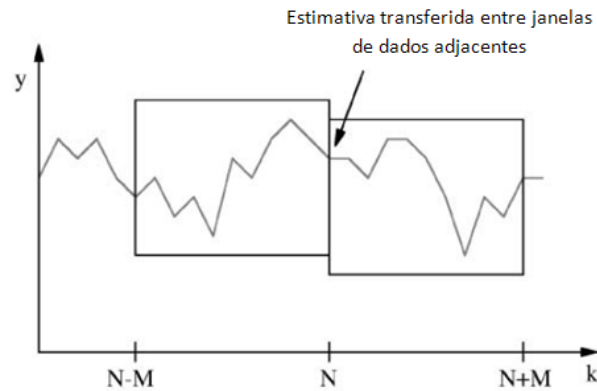


Figura 2.7: Diagrama da estratégia de atualização para a transferência de informação no tempo posterior (Rao *et al.*, 2001).

- (1) Um esquema de "suavização" que penaliza desvios da trajetória dos estados no horizonte de estimação a partir de uma estimativa *a priori*, conforme pode ser visto na Figura 2.8.

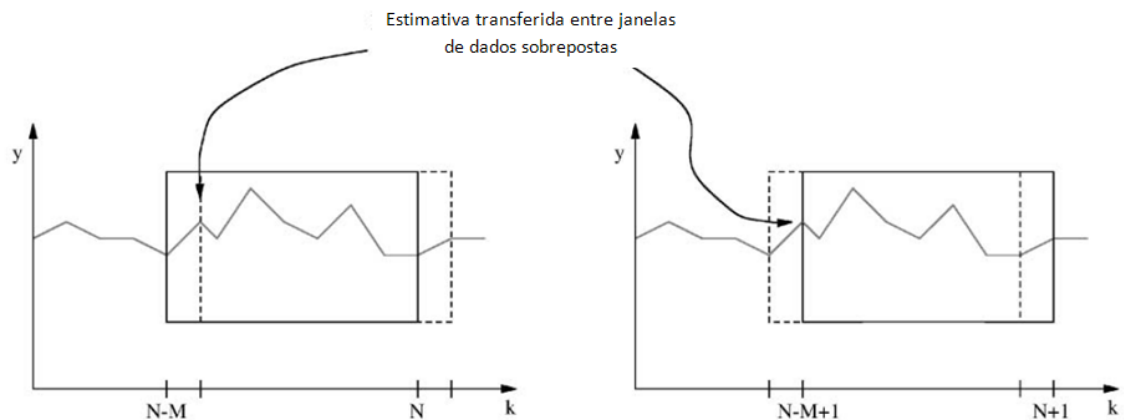


Figura 2.8: Diagrama da estratégia de suavização para a transferência de informação no tempo posterior (Rao *et al.*, 2001).

Para sistemas não-lineares, Tenny & Rawlings (2002) estimaram o custo marginal pela aproximação do sistema não-linear com restrições por um sistema linear, variante no

tempo e sem restrições e pela aplicação dos esquemas de filtragem e suavização correspondentes. Os autores concluíram que o esquema de suavização é superior ao esquema de filtragem, pois este último induz oscilações nas estimativas dos estados devido à propagação desnecessária do erro inicial.

2.3.2 Equacionamento da MHE

A modelagem matemática do sistema dinâmico freqüentemente resulta em um conjunto de equações diferenciais não-lineares (cf. também apresentado nas Equações 2.1 e 2.2):

$$\begin{aligned}\dot{x} &= f(x, u, t) + \omega(t) \\ x(0) &= x_0 \\ y &= h(x, t) + v(t)\end{aligned}\tag{2.34}$$

Em sistemas com amostragem, as equações contínuas em 2.34 devem ser transformadas para a forma de tempo discreto. Para sistemas não-lineares isto é usualmente feito pela integração do sistema no período de amostragem $\Delta t = t_k - t_{k-1}$:

$$\begin{aligned}x_k &= x_{k-1} + \int_{t_{k-1}}^{t_k} (f(x(\tau), u(\tau), \tau) + \omega(\tau)) d\tau \\ \tilde{x}_k &= f(x_k, u_k, t_k) + \omega_k \\ x(0) &= x_0 \\ y_k &= h(x_k, t_k) + v_k\end{aligned}\tag{2.35}$$

O índice k indica o tempo atual de amostragem $t=t_k$. Na Equação 2.36 são apresentadas as equações da integração dinâmica envolvidas na formulação da MHE, caso o sistema seja do tipo 2.34.

$$\begin{aligned}\hat{x}_{k-N|k} &= \hat{x}_{k-N|k-1} + \hat{\omega}_{k-N|k} \\ \hat{x}_{k-N+1|k} &= \hat{x}_{k-N|k} + \int_{t_{k-N}}^{t_{k-N+1}} f(x, u, \tau) d\tau + \hat{\omega}_{k-N|k} \\ \hat{x}_{k-N+2|k} &= \hat{x}_{k-N+1|k-1} + \int_{t_{k-N+2}}^{t_{k-N+1}} f(x, u, \tau) d\tau + \hat{\omega}_{k-N+1|k} \\ &\vdots \\ \hat{x}_{k|k} &= \hat{x}_{k-1|k} + \int_{t_{k-N+1}}^{t_k} f(x, u, \tau) d\tau + \hat{\omega}_{k-1|k}\end{aligned}\tag{2.36}$$

Na formulação da MHE, o problema de programação dinâmica não-linear, visto na Tabela 2.4, pode ser resolvido por estratégias seqüenciais ou simultâneas. Na estratégia seqüencial as restrições de igualdade são resolvidas a cada passo da otimização, com a integração numérica do sistema de equações diferenciais. Devido ao grande esforço numérico,

o cálculo da MHE seqüencial demanda um elevado tempo computacional. Outra desvantagem é a impossibilidade de controlar as restrições nos estados durante a integração do sistema pelos integradores tradicionais, por exemplo, o *Runge-Kutta*. Assim, caso a integração divirja, o algoritmo de otimização também não convergirá. Na estratégia simultânea as restrições de igualdade são transformadas em restrições de igualdade algébricas via técnicas de discretização. Uma das técnicas de discretização muito usada para a aproximação de equações diferenciais não lineares é o método dos resíduos ponderados (Cuthrell & Biegler, 1987), onde comumente se usa colocação ortogonal. Nesta técnica as variáveis de estado e controle são aproximadas por polinômios. Com o conjunto de restrições de igualdade algébricas, o problema pode ser resolvido usando os tradicionais algoritmos para resolução do problema de otimização quadrática (SQP, do inglês *Sequential Quadratic Programming*). Desta forma, é possível também controlar as restrições para os estados em cada passo de otimização. Gesthuisen *et al.* (2001) compararam ambos os métodos e observaram pequenas diferenças entre as estratégias seqüencial e simultânea em relação às estimativas dos estados. Entretanto, a aproximação seqüencial demandou um custo computacional bem mais elevado e menos robusto, uma vez que as restrições das variáveis de estado não são consideradas durante a integração.

Rao *et al.* (2003) sugerem que a atualização da equação da matriz de covariância dos estados $P_{k|k}^N$ seja calculada recursivamente usando a DRE. Os autores também enunciam que este resultado pode ser obtido pela derivação do filtro de Kalman determinístico usando programação dinâmica avançada.

$$P_{k|k}^N = \varphi_k P_{k-1|k-1}^N \varphi_k^T - \varphi_k P_{k-1|k-1}^N H_k^T \left[H_k P_{k-1|k-1}^N H_k^T + R_k \right]^{-1} H_k P_{k-1|k-1}^N \varphi_k^T + Q_k \quad (2.37)$$

Observa-se que a Equação 2.37 é equivalente a DRE usada para o cálculo de P na formulação do EKF-DRE (Equação 2.32) aplicada para cada tamanho do horizonte. Uma vantagem da atualização de $P_{k|k}^N$ via solução da DRE é que na etapa de transição da MHE são integradas apenas as equações que descrevem o comportamento dinâmico do processo.

Por analogia, $P_{k|k}^N$ também pode ser calculada recursivamente usando a CRE, que também é equivalente à equação usada para o cálculo de P na formulação do EKF-CRE (Equação 2.33).

$$P_{k|k}^N = P_{k-1|k-1} + \int_{k-1}^k \begin{bmatrix} F(\tau) P^N(\tau) + P^N(\tau) F(\tau)^T \\ -P^N(\tau) H(\tau)^T R(\tau)^{-1} H(\tau) P^N(\tau) + Q(\tau) \end{bmatrix} d\tau \quad (2.38)$$

A atualização de $P_{k|k}^N$ via solução da CRE exige a integração simultânea do modelo dinâmico e das equações diferenciais relacionadas à matriz de covariância dos estados, aumentando consideravelmente o tamanho do sistema a ser integrado. Entretanto, a solução desta equação não está sujeita a erros devido à discretização do modelo, o que deve

proporcionar estimativas mais precisas dos estados para os casos em que a não-linearidade do sistema é acentuada.

2.4 Filtro de Kalman Estendido com Restrições

A formulação do CEKF (Gesthuisen *et al.*, 2001) consiste basicamente na resolução do problema de otimização da MHE considerando que o comprimento do horizonte é nulo ($N=0$). O comprimento nulo implica que as equações diferenciais ordinárias não são consideradas no problema de otimização, o que simplifica a complexidade da resolução de um problema de otimização dinâmica não-linear.

As equações que compõem a etapa de atualização do CEKF resolvido por SQP são descritas na Tabela 2.4. Nota-se que quando o comprimento do horizonte é considerado nulo ($N=0$) no problema de otimização da MHE (Tabela 2.4), a formulação resultante é exatamente a formulação do CEKF. Se a equação da medida for linear, uma aproximação para este estimador pode ser feita considerando-se que as variáveis distúrbios ω e ν estejam relacionadas de forma quadrática. Deste modo, o problema de otimização do CEKF resolvido por SQP apresentado na Tabela 2.4 pode ser escrito na forma canônica de um problema de programação quadrática (QP, do inglês *Quadratic Programming*), também descrito na Tabela 2.4. É importante enfatizar que o problema de otimização da etapa de atualização do CEKF resolvido por SQP pode possuir vários mínimos locais, representando um esforço maior para o otimizador na busca do mínimo global. Por outro lado, a resolução deste problema por QP possui apenas um único mínimo global o que resulta em uma solução mais rápida. Além de demandar um baixo esforço computacional, existem *solvers* eficientes para a resolução do problema QP como, por exemplo, a rotina *quadprog* implementada no software Matlab[®].

Em contraste com as formulações sem restrições do EKF, a estimação de estados com o CEKF é realizada através de um problema de otimização em que restrições são incorporadas nas variáveis de estado. Além disso, o ganho de Kalman não precisa ser calculado e, conseqüentemente, é mais conveniente obter a matriz de covariância dos estados P através da solução da equação da matriz de Ricatti. Neste caso, indica-se a Equação 2.32 para o caso de problemas com dinâmica discreta e a Equação 2.33 para o caso de problemas com dinâmica contínua.

Embora o CEKF seja basicamente a resolução do problema de otimização do comprimento do horizonte como sendo nulo e pareça pertencer à família da MHE, esta formulação foi inicialmente proposta e referenciada como CEKF por Gesthuisen *et al.*, (2001). O CEKF é considerado similar ao EKF, pois ambos os estimadores levam em consideração um horizonte de comprimento nulo na etapa de atualização, ou seja, o estado atual é estimado apenas com a medida atual no horizonte de estimação e isto é equivalente ao horizonte de comprimento nulo. Na ausência de qualquer restrição e para incertezas pequenas no ruído de processo, ambos os estimadores fornecem exatamente o mesmo resultado. Mais recentemente, Vachhani *et al.* (2005) propuseram essencialmente a mesma formulação do CEKF proposta por Gesthuisen *et al.* (2001), porém referenciada de forma diferente:

Reconciliação de Dados Dinâmica Não-Linear (RNDDR, do inglês *Recursive Nonlinear Dynamic Data Reconciliation*). Entretanto, a nomenclatura mais antiga foi escolhida para ser adotada neste trabalho de tese.

Tabela 2.4: Equações que compõem o estágio de atualização - MHE, CEKF-SQP e CEKF-QP

	MHE	CEKF - SQP (Equação da medida não-linear)	CEKF - QP (Equação da medida linear)
Problema de Otimização	$\min_{\substack{\omega_{k-N+1 k}, \dots, \omega_{k-1 k} \\ \nu_{k-N+1 k}, \dots, \nu_{k k}}} \Psi_k^N = \left[\begin{array}{l} \hat{\omega}_{k-N+1 k}^T (P_{k-N+1 k-1})^{-1} \hat{\omega}_{k-N+1 k} \\ + \sum_{j=k-N}^{k-1} \hat{\omega}_{j k}^T (Q_{k-1})^{-1} \hat{\omega}_{j k} \\ + \sum_{j=k-N}^k \hat{\nu}_{j k}^T (R_k)^{-1} \hat{\nu}_{j k} \end{array} \right]$	$\min_{\omega_{k-1 k}, \nu_{k k}} \Psi_k = \left[\begin{array}{l} \hat{\omega}_{k-1 k}^T (P_{k-1 k-1})^{-1} \hat{\omega}_{k-1 k} \\ + \hat{\nu}_{k k}^T (R_k)^{-1} \hat{\nu}_{k k} \end{array} \right]$	$\min_{\Theta_{k k}} \Psi_k = \hat{\Theta}_{k k}^T (S_{k k})^{-1} \hat{\Theta}_{k k} + d^T \hat{\Theta}_{k k}$ $\hat{\Theta}_{k k} = \begin{bmatrix} \omega_{k-1 k} \\ \nu_{k k} \end{bmatrix} \quad S = \begin{bmatrix} P_{k-1 k-1} & 0 \\ 0 & R_k \end{bmatrix}$ $d = 0$
Restrições de Igualdade	$\hat{x}_{k-N k} = \hat{x}_{k-N k-1} + \hat{\omega}_{k-N+1 k}$ $\hat{x}_{j+1 k} = f(\hat{x}_{j k}, u_j) + \hat{\omega}_{j k}, \quad j = k-N, \dots, k-1$ $y_j = h(\hat{x}_{j k}) + \hat{\nu}_{j k}, \quad j = k-N, \dots, k$	$\hat{x}_{k k} = \hat{x}_{k k-1} + \hat{\omega}_{k-1 k}$ $y_k = h(\hat{x}_{k k}) + \hat{\nu}_{k k}$	$[H \quad I] \hat{\Theta}_{k k} = y_k - h(\hat{x}_{k k-1})$
Restrições de Desigualdade	$x_{\min} \leq \hat{x}_{j k} \leq x_{\max}$ $\hat{\omega}_{\min} \leq \hat{\omega}_{j-1 k} \leq \hat{\omega}_{\max}, \quad j = k-N, \dots, k$ $\hat{\nu}_{\min} \leq \hat{\nu}_{j k} \leq \hat{\nu}_{\max}, \quad j = k-N, \dots, k$	$x_{\min} \leq \hat{x}_{k k} \leq x_{\max}$ $\hat{\omega}_{\min} \leq \hat{\omega}_{k-1 k} \leq \hat{\omega}_{\max}$ $\hat{\nu}_{\min} \leq \hat{\nu}_{k k} \leq \hat{\nu}_{\max}$	
Atualização dos Estados	$\hat{x}_{k-N+1 k} = \hat{x}_{k-N+1 k-1} + \hat{\omega}_{k-N+1 k}^*$ $\hat{x}_{j+1 k} = f(\hat{x}_{j k}, u_j) + \hat{\omega}_{j k}^*, \quad j = k-N, \dots, k-1$ $y_j = h(\hat{x}_{j k}) + \hat{\nu}_{j k}^*, \quad j = k-N, \dots, k$	$\hat{x}_{k k} = \hat{x}_{k k-1} + \hat{\omega}_{k-1 k}^*$ $y_k = h(\hat{x}_{k k}) + \hat{\nu}_{k k}^*$	

Referências

- BROWN, R. G.; HWANG, P. Y. *Introduction to Random Signals and Applied Kalman Filtering with Matlab Exercises and Solutions*. In: 1997. Wiley. 1997.
- CRAIN II, T. P. Kalman Filters as Dynamic System State Observers. In: S. ISA-THE INSTRUMENTATION, AND AUTOMATION SOCIETY (Ed.). *The Mechatronics Handbook*: CRC Press, 2002.
- CUTHRELL, J. E.; BIEGLER, L. T. On the optimization of Differential-Algebraic process systems. *AIChE Journal*. v.33, n.8, p.1257-1270, 1987.
- GESTHUISEN, R.; KLATT, K.-U.; ENGELL, S. *Optimization-based state estimation - a comparative study for the batch polycondensation of PET*. In: ECC, 2001. Porto. 2001. p.1062-1067.
- GREWAL, M. S.; ANDREWS, A. P. *Kalman Filtering: Theory and Practice Using MATLAB*. Wiley & Sons, 2001.
- HASELTINE, E. L.; RAWLINGS, J. B. Critical evaluation of extended Kalman filtering and moving-horizon estimation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. v.44, n.8, p.2451-2460, 2005.
- JAZWINSKI, A. *Stochastic Processes and Filtering Theory*. New York: Academic Press, 1970.
- KALMAN, R.; BUCY, R. New results in linear in linear filtering and prediction theory. *ASME Journal of Basic Engineering*. v.83, p.95-108, 1961.
- MUSKE, K. R.; RAWLINGS, J. B. Nonlinear Moving Horizon State Estimation. In: R. BERBER (Ed.). *Methods of Model-Based Control*: Kluwer Academic Publishers, 1995. V.293, Series E, p.349-365.
- NICHOLAS, J. H. The Scaling and Squaring Method for the Matrix Exponential Revisited. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* v.26, n.4, p.1179-1193, 2005.
- PHAM, D. T.; VERRON, J.; ROUBAUD, M. C. A singular evolutive extended Kalman filter for data assimilation in oceanography. *Journal of Marine Systems* v.16, n.3-4, p.323-340., 1998.
- RAJAMANI, M. R. *Data-based Techniques to Improve State Estimation in Model Predictive Control*. Doctoral Thesis -. University of Wisconsin, Madison 2007.
- RAO, C. V.; RAWLINGS, J. B. Constrained process monitoring: Moving-horizon approach. *AIChE Journal*. v.48, n.1, p.97-109, 2002.
- RAO, C. V.; RAWLINGS, J. B.; LEE, J. H. Constrained linear state estimation - a moving horizon approach. *Automatica*. v.37, n.10, p.1619-1628, 2001.
- RAO, C. V.; RAWLINGS, J. B.; MAYNE, D. Q. Constrained state estimation for nonlinear discrete-time systems: Stability and moving horizon approximations. *IEEE Transactions on Automatic Control*. v.48, n.2, p.246-258, 2003.
- RAWLINGS, J. B.; BAKSHI, B. R. Particle filtering and moving horizon estimation. *Computers & Chemical Engineering*. v.30, n.10-12, p.1529-1541, 2006.

ROBERTSON, D. G.; LEE, J. H.; RAWLINGS, J. B. A moving horizon-based approach for least-squares estimation. *AIChE Journal*. v.42, n.8, p.2209-2224, 1996.

SIMON, D. *Optimal State Estimation: Kalman, H Infinity, and Nonlinear Approaches*. Hoboken: Wiley-Interscience, 2006.

TENNY, M. J.; RAWLINGS, J. B. *Efficient Moving Horizon Estimation and Nonlinear Model Predictive Control*. In: American Control Conference, 2002. 2002.

VACHHANI, P.; RENGASWAMY, R.; GANGWAL, V.; NARASIMHAN, S. Recursive Estimation in Constrained Nonlinear Dynamical Systems. *AIChE Journal*. v.51, n.3, p.946-959, 2005.

VERLAAN, M.; HEEMINK, A. Tidal flow forecasting using reduced rank square root filters. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment (SERRA)* v.11, n.5, p.349-368, 1997.

Capítulo 3

Aspectos práticos da estimação de estados

O projeto adequado de um estimador de estados tem como premissa um modelo matemático representativo que capture o comportamento do processo. Além disso, o projeto do estimador de estados assume a observabilidade deste sistema, isto é, a combinação entre o modelo e as medições disponíveis deve fornecer informação suficiente para que todas as variáveis não medidas sejam estimadas. Com isso, o estimador de estados é visto como fundamental no controle preditivo de processos onde todas as variáveis no início do horizonte de predição devem ser conhecidas.

O desenvolvimento de um modelo, entretanto, exige um alto investimento de engenharia que só será despendido em práticas industriais caso seja esperado um retorno significativo deste investimento. Para superar esta limitação, uma sistematização da modelagem de um processo para o projeto, avaliação e implementação do sistema de controle é sugerida por Marquardt (1995). Yip & Marlin (2004) discutiram detalhadamente sobre a fidelidade do modelo, investigando fatores cruciais na decisão sobre a estrutura de modelo a ser usada em sistemas de otimização em tempo real, uma vez que estes sistemas dependem da qualidade do modelo da planta.

Os trabalhos mencionados enfatizam a importância de modelos precisos e recomendam o uso de modelos rigorosos baseados em primeiros princípios para serem usados com técnicas de controle avançado baseado em modelos. Entretanto, os autores não mencionam sobre a representação do modelo. Por exemplo, um mesmo modelo dinâmico não-linear pode ser determinado com diferentes definições dos estados. Neste capítulo será mostrado que a formulação do modelo a ser usado em um estimador de estados irá impactar na observabilidade do sistema e na sintonia das matrizes de covariância.

3.1 Formulação do problema de estimação de estados

O estimador de estado selecionado para ser usado neste capítulo foi o EKF híbrido apresentado na Seção 2.2.2 do capítulo anterior. Assim, o sistema não-linear considerado possui dinâmicas em tempo contínuo e observações discretas para atualização dos estados (medidas em tempo discreto) (Simon, 2006).

$$\begin{aligned}
 \dot{x} &= f(x, u, t, p) + \omega(t) \\
 x(0) &= x_0 \\
 y_k &= h_k(x_k, t_k) + v_k \\
 \omega(t) &\sim (0, Q) \\
 v_k &\sim (0, R_k)
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde x indica os estados, p indica os parâmetros, u indica as entradas determinísticas e y indica o vetor das variáveis medidas. O ruído de processo $\omega(t)$ e o erro de medida v_k são considerados como sendo aleatórios, gaussianos e brancos com média zero e covariância $Q(t)$ e $R(t)$, respectivamente.

O sistema da Equação 3.1 é linearizado a cada instante de tempo para obter as matrizes variantes no tempo:

$$F(t) = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{\hat{x}}, \quad H_k = \left(\frac{\partial h_k}{\partial x} \right)_{\hat{x}_{k|k-1}} \tag{3.2}$$

necessárias para o problema de estimação de estados. Estas matrizes são variantes no tempo, pelo fato de serem avaliadas com os valores das variáveis resultantes da solução do sistema de equações diferenciais ao longo do tempo.

3.2 Análise de observabilidade

Se um sistema é dito não-observável, isto significa que os valores atuais de alguns estados não podem ser obtidos através de outras variáveis medidas. Entretanto, os instrumentos de medição, principalmente relacionados a composição (também chamados de analisadores) são em geral muito caros e, assim, é necessário estabelecer o número mínimo de medições que, combinadas com um modelo matemático, garantam a observabilidade de um sistema.

Na literatura são encontradas diversas técnicas para a seleção de medidas para serem usadas em um problema de estimação de estados, como por exemplo, técnicas baseadas no mínimo valor singular (Oisiović & Cruz, 2001; Bian & Henson, 2006), em um problema de otimização (Singh & Hahn, 2006) e em métricas de reconciliação de dados (Chmielewski *et al.*, 2002). O objetivo deste estudo não é comparar o desempenho destas técnicas, mas sim

propor um algoritmo alternativo e simples para a seleção do melhor e menor conjunto de medidas necessárias para garantir a observabilidade de um sistema.

O algoritmo proposto é baseado no teste do posto (*rank test*), o qual é analisado pela decomposição em valor singular (SVD, do inglês *singular value decomposition*). Apesar da demanda computacional mais elevada, este método é o mais confiável para o cálculo do posto de uma matriz (Anderson *et al.*, 1999).

Também é necessário aplicar um critério de observabilidade juntamente com o teste do posto. Embora o critério de Kalman (Kalman, 1962) também possa ser aplicado neste caso, o critério escolhido para ilustrar o procedimento de cálculo do algoritmo proposto foi o Popov-Bevelic-Hautus (PBH) (Popov, 1973), apresentado a seguir.

3.2.1 Critério Popov-Bevelic-Hautus (PBH)

O sistema linear formado pelas matrizes jacobianas F e H , determinado na Equação 3.2, é observável se e somente se:

$$M(i) = \begin{bmatrix} \lambda(i)I - F \\ H \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

possuir posto igual a n (posto de coluna cheia) para todos os valores característicos λ_i ($i=1,2,\dots,n$) da matriz F (Sontag, 1998).

3.2.2 Algoritmo proposto para seleção do número mínimo de medidas

Na etapa de transição do EKF, os estados são obtidos através da integração do modelo não-linear e a matriz de covariância através do modelo linear. Neste caso, os critérios usados para analisar a observabilidade de um sistema geralmente consideram modelos linearizados, como no caso do critério PHB da Equação 3.3.

A fim de capturar a dinâmica do sistema, inicialmente é preciso gerar modelos lineares que representem diferentes regiões de operação e que sejam obtidos em intervalos de tempo condizentes com o tempo de amostragem da planta. Assim, o algoritmo proposto para a análise de observabilidade do sistema pode ser executado de acordo com o procedimento a seguir:

1. Dividir o horizonte de simulação em nl pontos de amostragem e linearizar o modelo não-linear em cada um destes pontos.

$$F_k (k = 1, 2, \dots, nl); nl = \frac{t_f}{t_s} \quad (3.4)$$

onde F_k é o k -ésimo modelo linearizado, nl é o número total de modelos linearizados, t_f é o horizonte de simulação (tempo final) e t_s é o tempo de amostragem.

2. Considerar inicialmente que todos os estados n podem ser medidos. Assim, o número de medidas m será igual ao número de estados ($H_{m=nm}$).

3. Remover iterativamente uma linha r (estado não-medido) da correspondente matriz H para cada um dos modelos linearizados (Equação 3.5).

4. Executar o critério de observabilidade escolhido.

Critério PBH

4.1. Determinar os autovalores λ_i da matriz F_k .

4.2. Montar uma matriz $S_{m \times n}$ que armazene o mínimo valor singular para cada estado não-medido r (linha) e cada valor característicos λ_i (coluna) considerando um conjunto de linhas j ($j \neq r$) da matriz H .

4.3. Determinar uma matriz $M_{n \times k}$ que armazene o menor elemento entre os valores característicos λ_i do modelo linearizado F_k (colunas de $S_{m \times n}$) para cada estado não-medido r (linhas de $S_{m \times n}$). Cada coluna da matriz $M_{n \times k}$ representa um modelo linearizado F_k e cada linha desta matriz representa um estado não-medido r .

$$\begin{aligned}
 &\text{for } k = 1 : nl \\
 &\quad \text{for } r = 1 : m \\
 &\quad\quad j = [1 : (r - 1), (r + 1) : m] \\
 &\quad\quad \text{for } i = 1 : n \\
 &\quad\quad\quad S(r, i) = \min(\text{svd}([\lambda(i) \times I - F(k); H(j, :)])) \\
 &\quad\quad \text{end} \\
 &\quad\quad M(r, k) = \min(S(r, i)) \\
 &\quad \text{end} \\
 &\text{end}
 \end{aligned} \quad (3.5)$$

5. Determinar um vetor W que armazene o menor elemento entre os modelos linearizados F_k (colunas de $M_{n \times k}$) para cada estado não-medido r (linhas de $M_{n \times k}$) para obter a magnitude de cada medida.

$$W(r, 1) = \min(M(r, k)) \quad (3.6)$$

6. Remover a linha da matriz H (estado medido) que corresponde ao maior elemento (maior mínimo valor singular) do vetor W .

7. Calcular a observabilidade do sistema considerando todos os modelos lineares e a nova matriz H , usando o critério de observabilidade expresso na Equação 3.3.

8. Critério de parada do algoritmo:

8.1. Caso o sistema ainda seja observável, ir para o passo 3 e repetir o procedimento.

8.2. Caso o sistema seja não-observável, finalizar o algoritmo. O conjunto com o número mínimo de medidas necessárias para garantir a observabilidade do sistema é obtido com o último vetor W calculado (Equação 3.6).

3.3 Sintonia das matrizes de covariância

Enquanto a matriz de covariância do ruído de medida, R , pode ser derivada diretamente da reprodutibilidade do instrumento de medição, a escolha da matriz de covariância do ruído de processo, Q , é menos direta. A confiabilidade do modelo deve ser especificada ao filtro através da seleção da matriz Q e, se esta matriz for subestimada, o filtro acreditará excessivamente no modelo e não usará adequadamente as medidas em linha para corrigir os estados do sistema. Conseqüentemente, isto pode levar a um desempenho ruim do filtro e até mesmo a sua divergência. Por outro lado, se a matriz Q é superestimada, as estimativas dos estados serão ruidosas e sujeita a incertezas, o que levaria a valores elevados da matriz de covariância dos estados, P . Em suma, a escolha correta dos valores dos parâmetros sintonizados é muito importante para o sucesso da aplicação do EKF (Valappil & Georgakis, 2000).

3.3.1 Conversão das matrizes de covariância para definições de estados diferentes

A sintonia correta das matrizes Q e R não é apenas função das características dos ruídos, mas também da definição dos estados do modelo. Desta forma, nesta secção será mostrado como a matriz Q sintonizada para um sistema definido por estados que podem ser tratados como fracamente correlacionados (Equação 3.1), isto é, uma matriz Q diagonal, pode ser convertida para ser usada em um sistema definido por estados fortemente correlacionados representados por z e definido abaixo.

$$\begin{aligned}
\dot{z} &= \bar{f}(z, u, t, p) + \omega_z(t) \\
z(0) &= z_0 \\
y_{z_k} &= \bar{h}_k(z_k, t_k) + v_{z_k} \\
\omega_z(t) &\sim (0, Q_z) \\
v_{z_k} &\sim (0, R_{z_k})
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Os novos estados z são definidos em função dos estados originais x (Equação 3.1) pela transformação:

$$z = g(x) \tag{3.8}$$

Para mostrar como converter a matriz Q sintonizada para o sistema definidos pelos estados x (Equação 3.1) para ser usada no sistema definido pelos estados z (Equação 3.7) é preciso inicialmente introduzir uma matriz transformação T definida pela Equação 3.9.

$$T = \begin{bmatrix} \frac{\partial z_1}{\partial x_1} & \frac{\partial z_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial z_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial z_2}{\partial x_1} & \frac{\partial z_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial z_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial z_n}{\partial x_1} & \frac{\partial z_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial z_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \tag{3.9}$$

o qual é a matriz Jacobiana formada pela diferenciação dos novos estados z em relação aos estados originais x :

$$dz = \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial g}{\partial x} \end{bmatrix}}_T dx \tag{3.10}$$

Geralmente, por simplicidade, a matriz Q é ajustada como uma matriz diagonal onde a correlação entre os estados é negligenciada. Conseqüentemente, este tipo de ajuste não é válido para sistemas com estados fortemente correlacionados.

Considere, por exemplo, que uma matriz Q diagonal e invariante no tempo funcione bem para o sistema composto pelos estados x (Equação 3.1). Para que esta matriz Q proporcione ao estimador um desempenho comparável quando usada no sistema composto pelos estados z (Equação 3.7), é preciso determinar uma nova matriz Q_z , ajustada através da matriz T introduzida na Equação 3.9:

$$Q_z = TQT^T \tag{3.11}$$

Sendo Q_z uma matriz não-diagonal e variante no tempo.

Não somente a matriz Q , mas também a matriz R ajustada para ser usada com o sistema composto pelos estados x deve ser convertida quando usada no sistema composto pelos estados z de modo a obter um desempenho comparável do estimador. Assim a nova matriz R_z é definida como:

$$R_z = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_z}{\partial y} \end{pmatrix} R_x \begin{pmatrix} \frac{\partial y_z}{\partial y} \end{pmatrix}^T \quad (3.12)$$

3.4 Estudo de caso: Reator semi-batelada Williams Otto

A descrição do processo do reator semi-batelada Williams-Otto, conforme introduzido por Forbes (1994), é apresentada nesta secção.

As seguintes reações acontecem no reator:



A Figura 3.1 mostra o esquema do processo do reator semi-batelada Williams-Otto. O reagente A já está presente no reator, enquanto que o reagente B é alimentado continuamente no reator. Durante as reações exotérmicas, tanto os produtos P e E assim como o produto secundário G são formados. O calor gerado pela reação exotérmica é removido pela jaqueta de resfriamento que é controlada pela manipulação da temperatura da água de resfriamento. As variáveis de controle manipuladas neste processo são a taxa da vazão de entrada do reagente B e a temperatura da água de resfriamento T_w , cujos valores são mantidos constantes neste estudo.

A formulação do modelo deste processo pode ser representada por dois conjuntos de estados diferentes:

- Estados em base mássica \rightarrow sistema de estados x (Equação 3.1), cuja sintonia da matriz Q pode ser bem descrita por uma matriz diagonal;
- Estados em base de fração mássica \rightarrow sistema de estados fortemente correlacionados z (Equação 3.7).

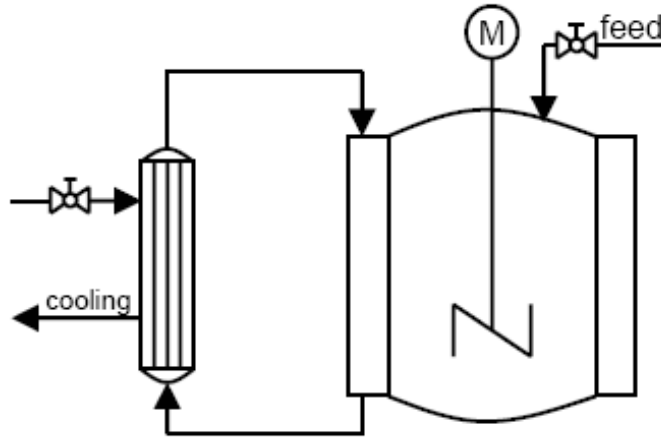


Figura 3.1: Esquema do processo do reator Williams-Otto.

3.4.1 Formulação de modelo com estados em base mássica

O equacionamento dos estados em base mássica é definido a seguir:

$$\frac{dm_A}{dt} = -r_1 V \quad (3.14)$$

$$\frac{dm_B}{dt} = F_B - \frac{M_B}{M_A} r_1 V + r_2 V \quad (3.15)$$

$$\frac{dm_C}{dt} = \frac{M_C}{M_A} r_1 V - \frac{M_C}{M_B} r_2 V - r_3 V \quad (3.16)$$

$$\frac{dm_P}{dt} = \frac{M_P}{M_B} r_2 V - \frac{M_P}{M_C} r_3 V \quad (3.17)$$

$$\frac{dm_E}{dt} = \frac{M_E}{M_B} r_2 V \quad (3.18)$$

$$\frac{dm_G}{dt} = \frac{M_G}{M_C} r_3 V \quad (3.19)$$

3.4.2 Formulação de modelo com estados em base de fração mássica

O equacionamento dos estados em base de fração mássica é definido abaixo:

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{1}{\rho} \left(-\frac{X_A F_B}{V} - r_1 \right) \quad (3.20)$$

$$\frac{dX_B}{dt} = \frac{1}{\rho} \left(\left(\frac{1 - X_B}{V} \right) F_B - \frac{M_B}{M_A} r_1 + r_2 \right) \quad (3.21)$$

$$\frac{dX_C}{dt} = \frac{1}{\rho} \left(-\frac{X_C F_B}{V} + \frac{M_C}{M_A} r_1 - \frac{M_C}{M_B} r_2 - r_3 \right) \quad (3.22)$$

$$\frac{dX_P}{dt} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{X_P F_B}{V} + \frac{M_P}{M_B} r_2 - \frac{M_P}{M_C} r_3 \right) \quad (3.23)$$

$$\frac{dX_E}{dt} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{X_E F_B}{V} + \frac{M_E}{M_B} r_2 \right) \quad (3.24)$$

$$\frac{dX_G}{dt} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{X_G F_B}{V} + \frac{M_G}{M_C} r_2 \right) \quad (3.25)$$

onde:

$$X_j = \frac{m_j}{\sum m_j} = \frac{m_j}{V\rho}; \quad j = A, B, C, P, E, G \quad (3.26)$$

As equações diferenciais ordinárias e as equações algébricas definidas abaixo, assim como os parâmetros apresentados na Tabela 3.1, são comuns a ambas as formulações de modelo:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{F_B}{\rho} \quad (3.27)$$

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{H - F_B c_p T_r}{V \rho c_p} \quad (3.28)$$

onde:

$$V = \frac{m_A + m_B + m_C + m_P + m_E + m_G}{\rho} \quad (3.29)$$

$$r_1 = k_1 \frac{m_A m_B}{V^2}; \quad r_2 = k_2 \frac{m_B m_C}{V^2}; \quad r_3 = k_3 \frac{m_C m_P}{V^2} \quad (3.30)$$

$$k_i = A_i e^{\frac{-E_i}{(T_r + T_{ref})}}; \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.31)$$

$$H = F_B c_p T_{in} - \Delta H_1 r_1 V - \Delta H_2 r_2 V - \Delta H_3 r_3 V - V \frac{A_0}{V_0} U (T_r - T_w) \quad (3.32)$$

Tabela 3.1: Parâmetros do modelo do reator semi-batelada Williams-Otto.

M_A	100 kg.kmol ⁻¹	T_{in}	35 °C	$m_A(t_0)$	2000 kg
M_B	200 kg.kmol ⁻¹	c_p	4,184 kJ.kg ⁻¹ .°C ⁻¹	$m_B(t_0)$	0
M_C	200 kg.kmol ⁻¹	ρ	1000 kg.m ⁻³	$m_C(t_0)$	0
M_P	100 kg.kmol ⁻¹	ΔH_1	-263,8 kJ.kg ⁻¹	$m_P(t_0)$	0
M_E	200 kg.kmol ⁻¹	ΔH_2	-158,3 kJ.kg ⁻¹	$m_E(t_0)$	0
M_G	300 kg.kmol ⁻¹	ΔH_3	-226,3 kJ.kg ⁻¹	$m_G(t_0)$	0
A_1	1,660x10 ³ m ³ .kg ⁻¹ .s ⁻¹	A_0	9,2903 m ²	$X_A(t_0)$	1
A_2	7,212x10 ⁵ m ³ .kg ⁻¹ .s ⁻¹	V_0	2,1052 m ³	$X_B(t_0)$	0
A_3	2,674x10 ⁹ m ³ .kg ⁻¹ .s ⁻¹	U	0,23082 kJ.(m ² .°C.s) ⁻¹	$X_C(t_0)$	0
E_1	6666,7 K	F_B	5,7840 kg.s ⁻¹	$X_P(t_0)$	0
E_2	8333,3 K	T_w	100 °C	$X_E(t_0)$	0
E_3	11111,1 K	$V(t_0)$	2 m ³	$X_G(t_0)$	0
T_{ref}	273,15 K	$T_r(t_0)$	65 °C		

3.5 Resultados e Discussão

Os estimadores de estados também podem ser usados para estimar os parâmetros desconhecidos de um sistema (Soroush, 1998). Deste modo, o vetor dos estados x pode ser aumentado com o parâmetro a ser estimado, p , para a obtenção de um vetor de estados aumentado x' (Simon, 2006) conforme abaixo:

$$x' = \begin{bmatrix} x \\ p \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

No estudo de caso considerado, o parâmetro E_1 (Equação 3.1) foi escolhido para ser estimado ($p=E_1$) junto com os demais estados do modelo do reator. Como o parâmetro cinético E_1 é constante, o modelo do sistema aumentado da Equação 3.1 pode ser redefinido como:

$$\begin{aligned} \dot{x}' &= \begin{bmatrix} f(x, u, t, E_1) \\ 0 \end{bmatrix} + \omega(t) \\ y_k &= \begin{bmatrix} h(x_k, t) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_k \\ E_1 \end{bmatrix} + v_k \end{aligned} \quad (3.34)$$

onde o vetor de estados x' é definido na Equação 3.35:

$$x' = [m_A \quad m_B \quad m_C \quad m_P \quad m_E \quad m_G \quad V \quad T_r \quad E_1] \quad (3.35)$$

e o modelo do sistema aumentado da Equação 3.7 pode ser redefinido como:

$$\begin{aligned} \dot{z}' &= \begin{bmatrix} \bar{f}(z, u, t) \\ 0 \end{bmatrix} + \omega(t) \\ y_k &= \begin{bmatrix} \bar{h}(z_k, t) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_k \\ E_1 \end{bmatrix} + v_k \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde o vetor de estados z' é definido na Equação 3.37:

$$z' = [X_A \quad X_B \quad X_C \quad X_P \quad X_E \quad X_G \quad V \quad T_r \quad E_1] \quad (3.37)$$

3.5.1 Estimação dos estados x

Análise de observabilidade

Para exemplificar a aplicação do algoritmo proposto para a seleção do número mínimo de medidas para garantir a observabilidade do sistema, o número total de modelos linearizados, nl , precisa ser determinado (passo 1). Para o estudo de caso em questão, o tempo da batelada considerado foi 1000s ($t_f=1000$) e o tempo de amostragem foi de 31,25s ($t_s=31,25$), assim:

$$nl = \frac{t_f}{t_s} = \frac{1000}{31,25} = 32 \quad (3.38)$$

Considera-se inicialmente que todos os estados são medidos, resultando no seguinte conjunto de medidas:

$$y = [m_A \quad m_B \quad m_C \quad m_P \quad m_E \quad m_G \quad V \quad T_r \quad E_1] \quad (3.39)$$

e, conseqüentemente, a matriz H (passo 2) é dada por:

$$H = I_{9 \times 9} \quad (3.40)$$

Após remover iterativamente uma linha r (estado não-medido) da correspondente matriz H para cada um dos 32 modelos linearizados F_k (passo 3), o critério de observabilidade pode ser executado (passo 4). Assim, pode-se obter o vetor W que identifica a magnitude de cada medida (passo 5):

$$W = [8 \times 10^{-4} \quad 5 \times 10^{-4} \quad 1,73 \times 10^{-2} \quad 5 \times 10^{-4} \quad 3 \times 10^{-4} \quad 4 \times 10^{-4} \quad 0 \quad 2,16 \times 10^{-1} \quad 1] \quad (3.41)$$

Observa-se que o maior mínimo valor singular pertence ao parâmetro E_1 , o qual pode ser descartado do vetor de medidas (passo 6) na próxima iteração do algoritmo.

Pela análise da observabilidade do novo vetor de medidas (passo 7), o sistema ainda é observável. Assim, retorna-se ao passo 3 e o procedimento é repetido (passo 8.1) até que o sistema torna-se não observável indicando que o algoritmo deve ser terminado (passo 8.2). Ao final, o conjunto com o número mínimo de medidas que garantem a observabilidade do sistema obtido com o último vetor W calculado é dado pela Equação 3.42.

$$y = [m_A \quad m_B \quad m_E \quad m_G \quad V] \quad (3.42)$$

É importante salientar que a prática comum de aumentar o vetor de estados de modo a executar simultaneamente a estimação de estados e parâmetros é, de modo geral, não recomendada, já que equações diferenciais adicionais geram linhas compostas por elementos nulos na matriz jacobiana dos estados (Equação 3.2). Isto torna mais difícil a obtenção de um conjunto de medidas que garanta a observabilidade do sistema, exigindo usualmente a inclusão de medidas adicionais. Neste exemplo, caso o vetor de estados não tivesse sido aumentado com o parâmetro E_1 , o sistema em questão seria observável sem a inclusão da medida da massa do reagente A (m_A).

Resultados da estimação de estados

Considera-se um desvio de 10% do valor nominal do parâmetro E_I . A estimativa da condição inicial dos estados é dada por:

$$x_0' = [2000 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 2 \ 65 \ 6000] \quad (3.43)$$

Os parâmetros do estimador de estados usados para a formulação de modelo com estados em base mássica são definidos nas equações abaixo:

$$P_0 = 0.01^2 I_{9 \times 9} \quad (3.44)$$

$$Q = 0.01^2 I_{9 \times 9} \quad (3.45)$$

$$R = \text{diag}(0.1^2 \ 0.1^2 \ 0.1^2 \ 0.01^2 \ 0.01^2) \quad (3.46)$$

Os resultados da estimação de estados para esta formulação de modelo são mostrados nas Figuras 3.2 e 3.3. Observa-se que a matriz Q diagonal e invariante no tempo dada pela Equação 3.45 proporciona um bom desempenho ao EKF para o caso em que o modelo do reator Williams-Otto é definido por um conjunto de estados definidos em base mássica.

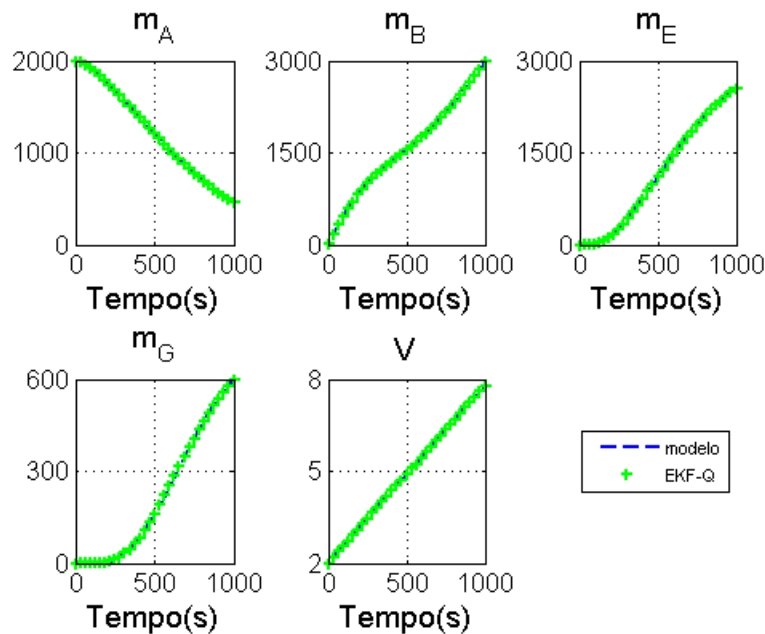


Figura 3.2: Desempenho do EKF para na filtragem dos estados medidos considerando a formulação de modelo com estados em base mássica.

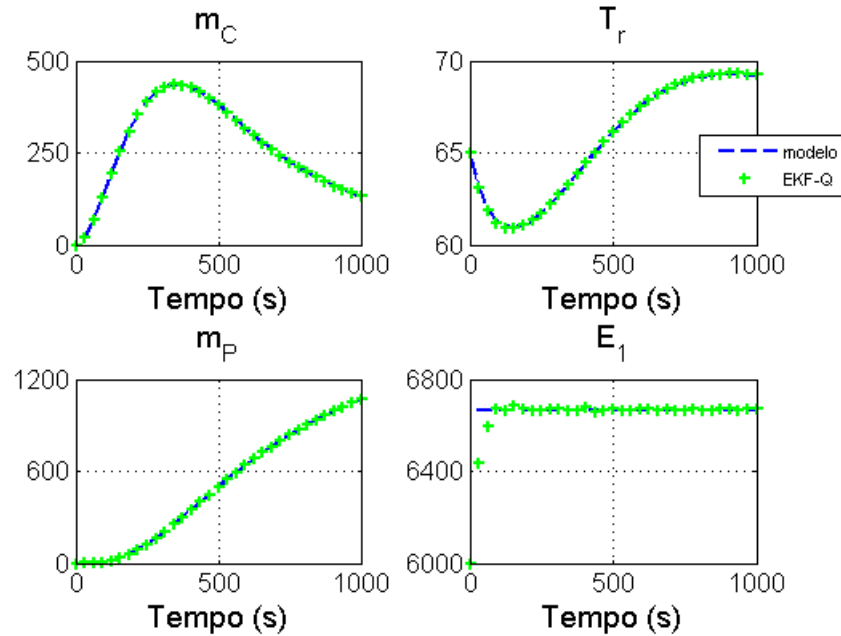


Figura 3.3: Desempenho do EKF para na estimação dos estados não-medidos e do parâmetro E_1 considerando a formulação de modelo com estados em base mássica.

3.5.2 Estimação dos estados z

Análise de observabilidade

Aplica-se novamente o algoritmo proposto para a seleção do número mínimo de medidas para garantir a observabilidade do sistema considerando a formulação de modelo com estados em base de fração mássica. O vetor de medidas y_z resultante para este caso é dado na Equação 3.47:

$$y_z = [X_A \quad X_B \quad X_E \quad X_G] \quad (3.47)$$

Observa-se que a formulação requer um número de medidas menor que a formulação anterior, já que o volume do reator é obtido indiretamente através das frações mássicas.

Conversão das matrizes de covariância dos ruídos de medida e processo

No caso da formulação de modelo com estados em base de fração mássica, é necessário converter as matrizes de covariância dos ruídos de medida e processo para que o EKF obtenha desempenho comparável ao caso anterior.

A matriz de covariância do ruído de processo, definida como Q_z , é obtida conforme a Equação 3.11. A matriz de transformação dos estados T é definida para a formulação de modelo com estados em base mássica na Equação 3.48:

$$T = \begin{bmatrix} \frac{\partial X_i}{\partial m_j} & \frac{\partial X_i}{\partial V} & \frac{\partial X_i}{\partial T_r} & \frac{\partial X_i}{\partial E_l} \\ \frac{\partial V}{\partial m_j} & \frac{\partial V}{\partial V} & \frac{\partial V}{\partial T_r} & \frac{\partial V}{\partial E_l} \\ \frac{\partial T_r}{\partial m_j} & \frac{\partial T_r}{\partial V} & \frac{\partial T_r}{\partial T_r} & \frac{\partial T_r}{\partial E_l} \\ \frac{\partial E_l}{\partial m_j} & \frac{\partial E_l}{\partial V} & \frac{\partial E_l}{\partial T_r} & \frac{\partial E_l}{\partial E_l} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial X_i}{\partial m_j} & \frac{\partial X_i}{\partial V} & 0 & 0 \\ \frac{\partial V}{\partial m_j} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.48)$$

onde:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial X_i}{\partial m_i} \right)_{m_j \neq i, V, T_r, E_l} &= \frac{1}{V \rho} & \left(\frac{\partial X_i}{\partial m_j} \right)_{m_k \neq i, j, V, T_r, E_l} &= \frac{-X_i}{V \rho} \\ \left(\frac{\partial X_i}{\partial V} \right)_{m_j, T_r, E_l} &= \frac{-X_i}{V} & \left(\frac{\partial V}{\partial m_j} \right)_{m_k \neq j, V, T_r, E_l} &= \frac{1}{\rho} \end{aligned} \quad (3.49)$$

Além disso, também é necessário converter a matriz de covariância das medidas, definida como R_z , variante no tempo e obtida conforme a Equação 3.12. Para a formulação, as relações entre os estados de ambas as formulações são apresentadas abaixo:

$$\frac{\partial X_i}{\partial m_i} = \frac{1}{V \rho} \quad (3.50)$$

$$\frac{\partial X_i}{\partial V} = \frac{-X_i}{V} \quad (3.51)$$

A matriz de covariância do ruído de medida das frações molares deve ser obtida considerando duas parcelas: uma relativa ao ruído de medida das massas e outra relativa ao ruído de medida do volume.

$$R_x = \text{diag}(R_{m_i}, R_V) \quad (3.52)$$

Desta forma, a matriz R_z correspondente pode ser expressa como:

$$R_{z_i} = \left(\frac{1}{V\rho} \right)^2 R_{m_i} + \left(\frac{-X_i}{V} \right)^2 R_V \quad (3.53)$$

Os valores iniciais das estimativas dos estados \hat{x}_0 e o valor inicial da matriz de covariância dos estados P_0 têm um efeito importante na matriz de covariância dos estados. Entretanto, não é apropriado considerá-los, e em particular P_0 , como um parâmetro de sintonia (Valappil & Georgakis, 2000). Para o estudo de caso examinado neste capítulo, deseja-se obter \hat{x}_0 como sendo o valor esperado do estado verdadeiro x_0 :

$$\hat{x}(0) = E[x(0)] \quad (3.54)$$

e P_0 é considerada uma matriz diagonal expressa por:

$$P(0) = E\left[(x(0) - \hat{x}(0)) (x(0) - \hat{x}(0))^T \right] \quad (3.55)$$

Assim, no estudo realizado neste capítulo, considera-se que os valores iniciais das estimativas dos novos estados \hat{z}_0 são equivalentes (considerando a conversão entre massas e frações mássicas) aos valores iniciais das estimativas dos estados originais \hat{x}_0 . Desta forma, considera-se a mesma matriz de covariância dos estados da Equação 3.44 para ambas as formulações ($P_{z_0} = P_0$).

Resultados da estimação de estados

Considera-se um desvio de 10% do valor nominal do parâmetro E_I . A estimativa da condição inicial dos novos estados z'_0 é dada por:

$$z'_0 = [1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 2 \ 65 \ 6000] \quad (3.56)$$

Os resultados para a estimação dos estados z usando as matrizes Q e R são comparados com os resultados obtidos pelas matrizes Q_z e R_z matrizes nas Figuras 3.4 e 3.5. Mesmo apresentando uma boa estimação (filtragem) dos estados medidos (Figura 3.4), a matriz Q diagonal e invariante no tempo não é capaz de fornecer uma estimação precisa dos estados não-medidos (Figura 3.5). Já o desempenho do EKF com uma matriz Q_z não-diagonal e variante no tempo melhora significativamente estes resultados.

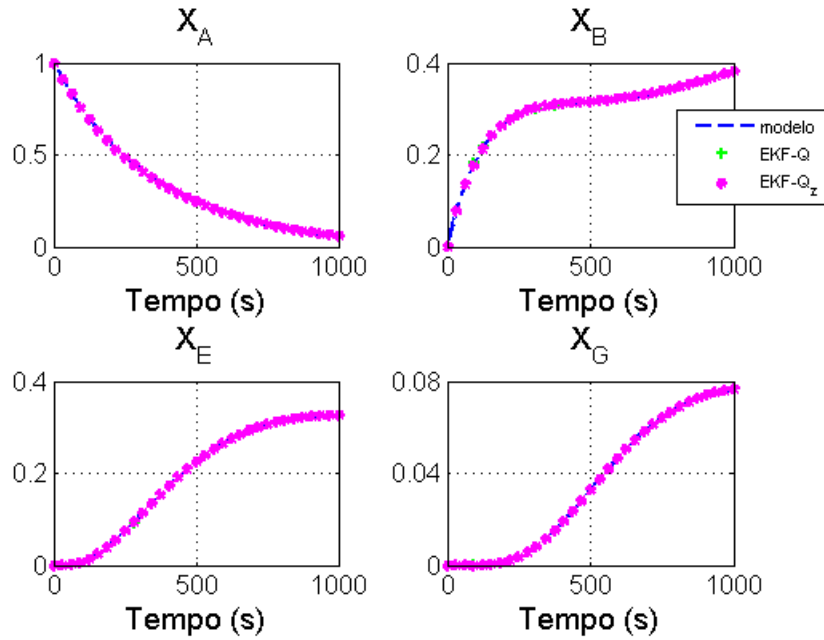


Figura 3.4: Desempenho do EKF para na filtragem dos estados medidos considerando a formulação de modelo com estados em base de fração mássica.

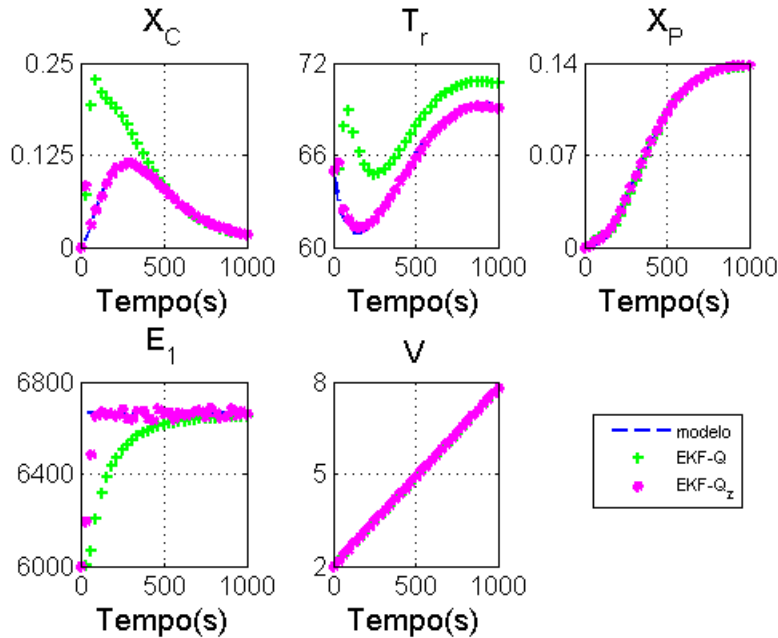


Figura 3.5: Desempenho do EKF para na estimação dos estados não-medidos e do parâmetro E_1 considerando a formulação de modelo com estados em base de fração mássica.

3.6 Conclusões

O projeto adequado do estimador de estados deve combinar três fontes de conhecimento: medidas disponíveis, um modelo matemático representativo e as estatísticas do ruído. Neste capítulo foi proposto e aplicado um algoritmo para a seleção do número mínimo de medidas necessárias para tornar todos os estados de um sistema observáveis. Os passos do algoritmo foram exemplificados através do modelo do reator semi-batelada Williams-Otto. Os resultados mostraram que o EKF apresentou um bom desempenho na estimação dos estados considerando o conjunto de medidas fornecido pelo algoritmo proposto. É altamente recomendável que o modelo do processo seja analisado com este tipo de algoritmo antes de ser implementado em uma técnica de estimação de estados, especialmente no caso de reatores batelada e semi-batelada nos quais é possível que o conjunto de medidas que garantam a observabilidade mude ao longo da batelada. Entretanto, esta mudança não foi observada com o estudo de caso do reator semi-batelada Williams-Otto.

A prática comum de aumentar o vetor de estados com parâmetros para tornar possível uma estimação simultânea de estados e parâmetros foi analisada com o exemplo do reator semi-batelada Williams-Otto. Esta prática mostrou-se uma alternativa ruim, uma vez que as equações diferenciais adicionais dos parâmetros geram linhas contendo apenas elementos nulos na matriz jacobiana dos estados, tornando mais difícil a obtenção de um sistema completamente observável. No caso deste exemplo, a inclusão de um parâmetro no vetor de estados exigiu a medida de uma outra concentração (estado estimado) para garantir a observabilidade do sistema.

Para o reator semi-batelada Williams-Otto foi mostrado que duas representações diferentes dos estados deste processo proporcionam desempenhos bem diferentes para o EKF. Em geral, recomenda-se selecionar modelos cujo os estados sejam fracamente correlacionados para que as matrizes Q e R possam ser representadas adequadamente através de matrizes diagonais e constantes. Também foi proposto um método para converter as matrizes de covariância dos ruídos entre diferentes definições dos estados para que resultados similares da estimação de estados possam ser obtidos. Esta conversão gera uma matriz Q não-diagonal e variante no tempo e uma matriz R diagonal e variante no tempo, que melhoram significativamente a estimação dos estados para um modelo formulado com estados fortemente correlacionados. Considerando o reator semi-batelada Williams-Otto como estudo de caso, os resultados mostraram que as matrizes Q e R sintonizadas para uma dada definição de estados (base mássica) são convertidas com sucesso em uma outra (base de fração mássica), proporcionando um desempenho comparável do EKF.

Referências

ANDERSON, E.; BAI, Z.; BISCHOF, C.; BLACKFORD, S.; DEMMEL, J.; DONGARRA, J.; DU CROZ, J.; GREENBAUM, A.; HAMMARLING, S.; MCKENNEY, A.; SORENSEN, D. *LAPACK User's Guide - SIAM*. Philadelphia, 1999.

BIAN, S.; HENSON, M. Measurement selection for on-line estimation of nonlinear wave models for high purity distillation columns. *Chemical Engineering Science*. v.61, p.3210-3222, 2006.

CHMIELEWSKI, D.; PALMER, T.; MANOUSIOUTHAKIS, V. On the theory of optimal sensor placement. *AIChE Journal*. v.48, n.5, p.1001-1012, 2002.

FORBES, J. F. *Model Structure and Adjustable Parameter Selection for Operations Optimizations*. PhD Thesis –. McMaster University, Hamilton, 1994.

KALMAN, R. Canonical structure of linear dynamical systems. *Proc. Natl. Acad. Sci*. v.48, p.596-600, 1962.

MARQUARDT, W. Towards a Process Modeling Methodology. In: R. BERBER (Ed.). *Methods of Model-Based Control*: Kluwer Academic Publishers, 1995. V.293, Series E, p.3-41.

OISIOVICI, R.; CRUZ, S. Inferential Control of High-Purity Multicomponent Batch Distillation Columns Using an Extended Kalman Filter. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. v.40, p.2628-2639, 2001.

POPOV, V. *Hyperstability of Control Systems*. Berlin: Springer-Verlag, 1973.

SIMON, D. *Optimal State Estimation: Kalman, H Infinity, and Nonlinear Approaches*. Hoboken: Wiley-Interscience, 2006.

SINGH, A.; HAHN, J. Sensor location for stable nonlinear dynamics system. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. v.45, p.3615-3623, 2006.

SONTAG, E. D. *Mathematical Control Theory: Deterministic Finite Dimensional Systems*. New York: Springer, 1998.

SOROUGH, M. State and parameter estimations and their applications in process control. *Computers & Chemical Engineering*. v.23, n.2, p.229-245, 1998.

VALAPPIL, J.; GEORGAKIS, C. Systematic estimation of state noise statistics for extended Kalman filters. *AIChE Journal*. v.46, n.2, p.292-308, 2000.

YIP, W. S.; MARLIN, T. E. The effect of model fidelity on real-time optimization performance. *Computers & Chemical Engineering*. v.28, n.1-2, p.267-280, 2004.

Capítulo 4

Applications of state estimators for monitoring and control of bioprocesses

Artigo submetido para publicação no periódico *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*.

Resumo: De modo a motivar o uso dos estimadores de estado como uma ferramenta para a melhoria do desempenho operacional de bioprocessos, as aplicações desta ferramenta, revisadas no capítulo de introdução, são ilustradas neste artigo através de um biorreator que utiliza a bactéria *Zymomonas mobilis* para a produção de etanol (Jöbses *et al.*, 1986). Com este propósito, três técnicas de estimação de estados foram avaliadas usando o modelo deste biorreator: Filtro de Kalman Estendido (EKF), Filtro de Kalman Estendido com Restrições (CEKF) e a Estimação de Horizonte Móvel (MHE). A formulação referenciada neste trabalho como CEKF&S (do inglês, *Constrained Extended Kalman Filter & Smoother*) também foi introduzida neste capítulo. Os resultados obtidos mostram a relevância dos estimadores de estado para bioprocessos. Além disso, observou-se que a melhor relação entre a precisão das estimativas e a viabilidade de aplicação prática é obtida com o CEKF, uma vez que esta formulação demanda menor esforço computacional que a MHE, apresentando desempenho comparável. Também foi mostrado que a formulação CEKF&S proposta pode ser vista como uma solução alternativa eficiente para a MHE no caso de estimativas ruins da condição inicial dos estados.

Applications of State Estimators for Monitoring and Control of Bioprocesses

Nina Paula Gonçalves Salau¹, Fabio Cesar Diehl¹, Jorge Otávio Trierweiler¹, Argimiro Resende Secchi².

¹GIMSCOP-Chemical Engineering Department, Federal University of Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brazil, e-mail: {ninas, fcdiehl, jorge}@enq.ufrgs.br; ²PEQ-COPPE-Chemical Engineering Program, Federal University of Rio de Janeiro, CxP. 68502, CEP: 21941-972, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, e-mail: arge@peq.coppe.ufrj.br.

Abstract

BACKGROUND: Nowadays many advanced control tools are available to improve industrial processes (e.g. virtual analyzers, state estimators, predictive and multivariable controllers, etc.). Particularly, state estimation techniques have a long development history focused mainly to supply the lack of system measurements. Between the applications involved by state estimators we can highlight: more detailed process monitoring, mathematical model fitting and update, transient data reconciliation and feedback control. The goal of our work is showing the advantages of using state estimators as a tool for better operation of a bioprocess and to illustrate how a state estimator can be easily implemented.

RESULTS: We evaluate these applications using three state estimation techniques in a bioreactor: Extended Kalman Filter (EKF), Constrained Extended Kalman Filter (CEKF), and Moving Horizon Estimator (MHE). Further we introduce the CEKF & Smoother (CEKF&S) as a simple and efficient alternative to MHE. As benchmark case study we have chosen the continuous glucose fermentation with *Zymomonas mobilis* bacteria to produce ethanol.

CONCLUSION: Our results clearly show the relevance of state estimators as a tool to improve the bioprocesses operation. The better relationship between performance and practical application is obtained with the CEKF formulation, because it requires small computational effort than MHE with comparable performance. Further, the proposed CEKF&S can be seen as an efficient solution for the poor guesses of the initial state problem.

Keywords: Ethanol; Nonlinear dynamic behavior; State estimation; Bioreactor control.

Introduction

According to Alford¹, improvements to bioprocess productivity generally come from two sources: cell lines and process control. Historically, the most profit way to obtain productive increase, in a bioprocess plant, is linked to the fermentative process strain evolution². However, the last decades reveal significant advances in the process control area to reduce production costs, increase productivity, and improve product quality³. This alternative makes possible to conduct the plant to the optimum operating condition by a supervisory system, and this system can be viewed as an expert operator managing the plant⁴. This furnishing provides the right concentration of nutrients in the culture medium (e.g. nitrogen, oxygen, phosphorous, sulfur), removing toxic metabolic products (e.g. CO₂), and controlling important internal cellular parameters (e.g. temperature, pH)¹. To reach this goal is necessary to feedback information from the process to a control system in real time. Some variables as temperature, pH, pO₂, agitation, foam level, and flow rate are relatively easy to measure in real time. However, some essential variables (e.g. substrate, biomass, and product concentration) that indicate the fermentation state are not measured directly on line due to the lack of satisfactory measuring devices⁵. An approach to solve the real time quantify difficult problem consist in state estimation techniques⁶. Figure 1 shows a state estimator idea, where x , u , and y represent the states, inputs, and outputs, respectively.

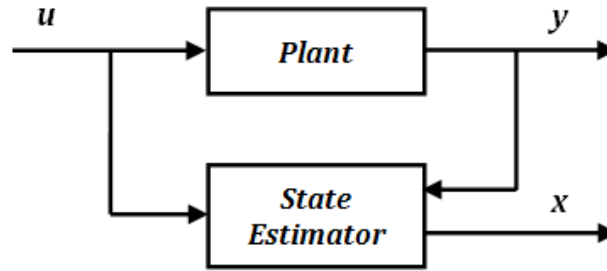


Figure 1: Generic state estimator.

Among several nonlinear state estimators, the Extended Kalman Filter (EKF) has received the most attention due to its relative simplicity and low computational effort, demonstrating effectiveness in handling some nonlinear problems. Nevertheless, it can give unreliable estimates if the system presents a high nonlinearity degree and has states subject to hard constraints (e.g. nonnegative concentrations or pressures). Due to the development of effective solvers for nonlinear optimization problems, optimization-based state estimators, such as the Moving Horizon Estimator (MHE) and Constrained Extended Kalman Filter (CEKF), simpler and computationally less demanding, have become an interesting alternative to common approaches such as EKF due to the possibility to consider states physical constraints into an optimization problem⁷.

In this paper we address the state estimation techniques focused on bioprocesses. Firstly, the state estimator applications are dealt with. Next, we discuss the EKF, MHE, CEKF formulations and introduce the proposed CEKF & Smoother (CEKF&S). Then, we present a motivating case study of a continuous fermentation with *Zymomonas mobilis* and show the results of the state estimators applied to this example.

Applicability of state estimators

Virtual analyzer and feedback control

Process monitoring and control require real-time information on the state variables of a process to ensure proper operation of the plant⁸. To calculate control actions, the controller require to feedback key process variables, such as product and biomass concentration or indices as growing rate. Measurements of these indices are rarely available on-line and are usually obtained by laboratory sample analyses. These laboratory measurements are available infrequently with substantial time delays between sampling times. Thus, these measurements must be estimated or inferred to be valid to control design. State estimation techniques can be used to implement a state-feedback control. This functionality enables the robust operation of the control system at various sample rates of plant-product quality measurements.

Parameters fitting and update

A suitable design of state estimators requires a representative model for capturing the plant behavior. State estimation theory can also be used to estimate unknown parameters of a model to improve its fidelity. In this case, the state vector must be augmented with the constant parameter vector and differential equations for the estimated parameters must be added to the model⁹. As it is assumed that parameters are constants, the right hand side of the corresponding differential equations is set to zero. Another way to estimate parameters via state estimation requires a dynamic model for each of unknown parameters to be estimated such as “*random walk*” and “*random ramp*”. Once appropriate parameter models are chosen, a state estimator is used to estimate the process parameters that appear as a subset of the state variables of the combined process and parameter models. This method has been used widely in chemical and biological engineering¹⁰.

Transient data reconciliation

State estimators, such as EKF, can also be applied as a tool for data pre-processing and transient data reconciliation in order to reduce the inaccuracy of process data due to measurement errors¹¹.

However, poor measurements can lead to estimates that violate the conservation laws used to model the system. As one often expects the estimates to satisfy the conservation laws, direct enforcement may require inequality constraints¹². In Rao & Rawlings¹² one can find a comparison between MHE and EKF in the problem of detecting the location and magnitude of a leak (gross error) in the wastewater treatment process. They have shown that MHE can significantly improve the quality of state estimates by incorporating prior knowledge in the form of inequality constraints. Besides, they suggested that one would model all leak possibilities and then discriminate between the various scenarios using inequality constraints. Applying the filter with the inequality constraints makes possible to use it as fault detection procedure, since different scenarios can be analyzed to detect which one is the most plausible.

The application of state estimation techniques are summarized in Figure 2.

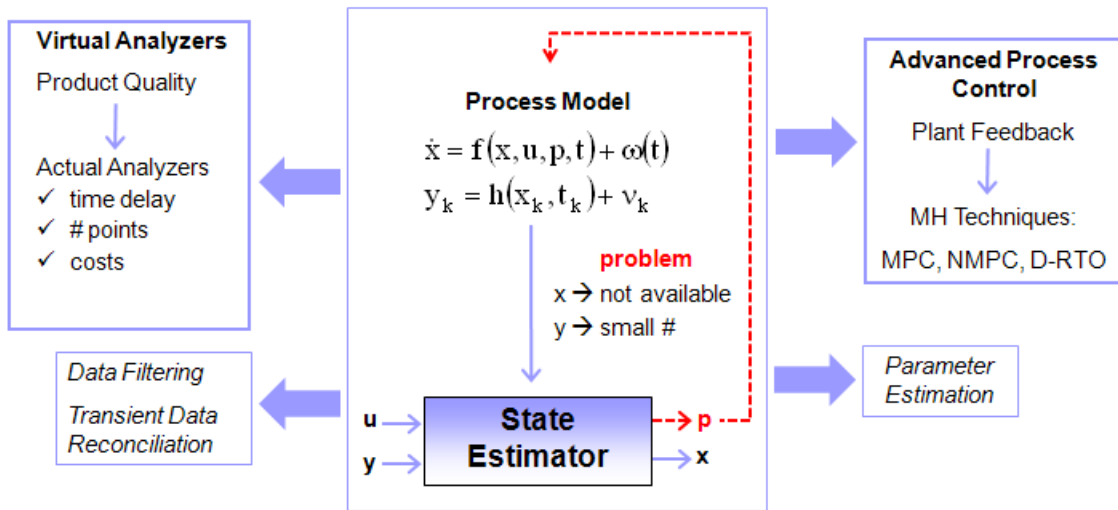


Figure 2: Application of state estimation techniques.

EKF, MHE, CEKF and CEKF&S

Consider the following nonlinear continuous-time system with discrete-time measurements:

$$\dot{x} = f(x, u, t) + \omega(t) \quad (1)$$

$$y_k = h(x_k, t_k) + v_k \quad (2)$$

where u denotes the deterministic inputs, x denotes the states, y denotes the measurements and k denotes the discrete-time index. The process-noise, ω , and the measurement-noise, v_k , are modeled as random variables solely characterized by their probability density functions (PDFs). Both are assumed to be white Gaussian random process with zero mean and covariance Q and R_k , respectively.

The system is linearized at each time step to obtain the local state-space matrices as below:

$$F = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x,u,t,p} \quad (3)$$

$$H = \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)_{x,u,t,p} \quad (4)$$

Extended Kalman Filter

We will focus on an EKF version in which the state covariance matrix is computed in a discrete time form. The equations that compose the different steps in this EKF version are given below.

State Transition Equation:

$$\hat{x}_{k|k-1} = \hat{x}_{k-1|k-1} + \int_{k-1}^k f(\hat{x}, u, \tau, p) d\tau \quad (5)$$

State Covariance Transition Equation:

$$P_{k|k-1} = \varphi_{k-1} P_{k-1|k-1} \varphi_{k-1}^T + Q_{k-1} \quad (6)$$

Kalman Gain Equation:

$$K_k = P_{k|k-1} H_k^T \left[H_k P_{k|k-1} H_k^T + R_k \right]^{-1} \quad (7)$$

where φ_{k-1} is the *state transition matrix* for the state at t_k given as

$$\varphi_{k-1} = e^{F(t_k - t_{k-1})} \quad (8)$$

State Update Equation:

$$\hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + K_k \left[y_k - h_k \left(\hat{x}_{k|k-1}, t_k \right) \right] \quad (9)$$

State Covariance Update Equation:

$$P_{k|k} = P_{k|k-1} - P_{k|k-1} H_k^T \left[H_k P_{k|k-1} H_k^T + R_k \right]^{-1} H_k P_{k|k-1} \quad (10)$$

In order to compare the EKF and the optimization-based estimators (MHE, CEKF and CEKF&S), we first need to derive yet another form for the EKF. After combining and rearranging Equations (6), (7) and (10), one obtains an alternate form for the one-step state covariance equation as follows:

$$P_{k|k} = \varphi_k P_{k-1|k-1} \varphi_k^T - \varphi_k P_{k-1|k-1} H_k^T \left[H_k P_{k-1|k-1} H_k^T + R_k \right]^{-1} H_k P_{k-1|k-1} \varphi_k^T + Q_k \quad (11)$$

The equation above is called as the discrete Riccati equation (DRE). Details on the derivation of this alternate EKF form are found in Simon⁹. However, we will also refer this formulation as EKF in this work.

Moving Horizon Estimator

Before explaining the CEKF formulation, the basic aspects about the MHE^{13,14,15} is presented. The basic idea of MHE is to proceed with state estimation by using only the most recent $N+1$ measurements, where N is the time horizon size.

The moving horizon approximation of the objective function of Equation (12) is solved by sequential quadratic programming (SQP):

$$\min_{\substack{\omega_{k-N|k}, \dots, \omega_{k-1|k} \\ v_{k-N|k}, \dots, v_{k|k}}} \Psi_k^N = \left[\begin{array}{l} \hat{\omega}_{k-N|k}^T (P_{k-N-1|k-1})^{-1} \hat{\omega}_{k-N-1|k} \\ + \sum_{j=k-N}^{k-1} \hat{\omega}_{j|k}^T (Q_{k-1})^{-1} \hat{\omega}_{j|k} + \sum_{j=k-N}^k \hat{v}_{j|k}^T (R_k)^{-1} \hat{v}_{j|k} \end{array} \right] \quad (12)$$

subject to the equality constraints

$$\begin{aligned} \hat{x}_{k-N|k} &= \hat{x}_{k-N|k-1} + \hat{\omega}_{k-N-1|k} \\ \hat{x}_{j+1|k} &= \int_j^{j+1} f(\hat{x}, u, \tau) d\tau + \hat{\omega}_{j|k}, \quad j = k-N, \dots, k-1 \\ y_j &= h(\hat{x}_{j|k}) + \hat{v}_{j|k}, \quad j = k-N, \dots, k \end{aligned} \quad (13)$$

and the inequality constraints

$$\begin{aligned} x_{\min} &\leq \hat{x}_{j|k} \leq x_{\max} \\ \hat{\omega}_{\min} &\leq \hat{\omega}_{j-1|k} \leq \hat{\omega}_{\max}, \quad j = k-N, \dots, k \\ \hat{v}_{\min} &\leq \hat{v}_{j|k} \leq \hat{v}_{\max}, \quad j = k-N, \dots, k \end{aligned} \quad (14)$$

Rao *et al.*¹⁵ suggest computing the state covariance matrix $P_{k|k}^N$ recursively using the discrete Riccati equation.

$$P_{k|k}^N = \varphi_k P_{k-1|k-1}^N \varphi_k^T - \varphi_k P_{k-1|k-1}^N H_k^T \left[H_k P_{k-1|k-1}^N H_k^T + R_k \right]^{-1} H_k P_{k-1|k-1}^N \varphi_k^T + Q_k \quad (15)$$

Note that the equation above is the same as for Equation (11) applied to each horizon step.

Constrained Extended Kalman Filter

CEKF follows from the MHE when the horizon length is set to zero⁷. Zero length implies that ODEs are not considered into the optimization problem, which simplifies the complexity of solving a nonlinear dynamic optimization problem.

Setting ($N=0$) into the MHE optimization problem (Equation (12)), the resulting formulation is exactly the CEKF formulation problem.

$$\min_{\omega_{k-l|k}, v_{k|k}} \Psi_k = \left[\hat{\omega}_{k-l|k}^T (P_{k-l|k-l})^{-1} \hat{\omega}_{k-l|k} + \hat{v}_{k|k}^T (R_k)^{-1} \hat{v}_{k|k} \right] \quad (16)$$

If the measurement equation is linear (or linearized), the resulting problem is a quadratic program (QP) which can be solved with small computational effort⁷:

$$\min_{\hat{\Theta}_{k|k}} \Psi_k = \hat{\Theta}_{k|k}^T S_{k|k}^{-1} \hat{\Theta}_{k|k} + d^T \hat{\Theta}_{k|k} \quad (17)$$

where

$$\hat{\Theta}_{k|k} = \begin{bmatrix} \omega_{k-1|k} \\ \mathbf{v}_{k|k} \end{bmatrix} \quad S = \begin{bmatrix} P_{k-1|k-1} & 0 \\ 0 & R_k \end{bmatrix} \quad d = 0 \quad (18)$$

subject to the equality constraint

$$\begin{bmatrix} H & I_{ny} \end{bmatrix} \hat{\Theta}_{k|k} = y_k - h(\hat{x}_{k|k-1}) \quad (19)$$

and inequality constraints

$$\begin{aligned} x_{\min} &\leq \hat{x}_{k|k} \leq x_{\max} \\ \hat{\omega}_{\min} &\leq \hat{\omega}_{k-1|k} \leq \hat{\omega}_{\max} \\ \hat{\mathbf{v}}_{\min} &\leq \hat{\mathbf{v}}_{k|k} \leq \hat{\mathbf{v}}_{\max} \end{aligned} \quad (20)$$

where ny is the number of measurements.

The estimators presented above are initialized by the initially expected state and state covariance:

$$\hat{x}_{0|0} = E[x(0)] \quad (21)$$

$$P_{0|0} = E\left[(x(0) - \hat{x}_{0|0})(x(0) - \hat{x}_{0|0})^T\right] \quad (22)$$

Constrained Extended Kalman Filter and Smoother (CEKF&S)

When the system is subjected to poor guesses of the initial state, the CEKF fails to swiftly converge to actual states¹⁶. It occurs because the CEKF (likewise to EKF) does not consider the important problem of smoothing, i.e., the update and transition steps allows one to estimate current and future values of the variables of interest, whereas the smoothing

permits one to estimate past values¹⁷. Further, smoothing in this context means to provide an estimate of the system state at some time step given all the measurements, including ones encountered after that particular time step, in other words, the smoother gives a smoothed estimate of the system history given all the measurements obtained so far. Thus, to overcome this CEKF limitation, we have included the EKF smoother counterpart in the CEKF to introduce the CEKF & Smoother (CEKF&S).

The difference between CEKF and CEKF&S is that the recursion in filter moves forward and in smoother backward¹⁸, as shown in Figure 3.

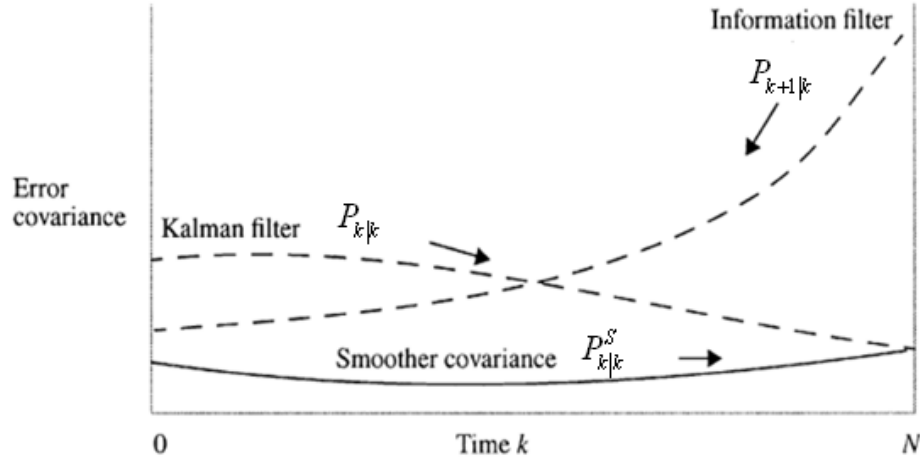


Figure 3: Illustrating the error covariance for forward filtering, backward filtering, and smoothing¹⁸.

Firstly one shall set $\hat{x}_{N|k}^S = \hat{x}_{k|k}$ and $P_{N|k}^S = P_{k|k}$. Now, considering $i = N-1, N-2, \dots, 1$, the Rauch-Tugh-Striebel (RTS) smoother¹⁷ equations added to CEKF are given as follows:

$$\hat{x}_{k+1|k} = \hat{x}_{k|k} + \int_k^{k+1} f(\hat{x}, u, \tau, p) d\tau \quad (23)$$

$$P_{k+1|k} = \varphi_k P_{k|k} \varphi_k^T + Q_k \quad (24)$$

$$C_k = P_{k|k} \varphi_k^T \left[P_{k+1|k} \right]^{-1} \quad (25)$$

$$\hat{\mathbf{x}}_{k|k}^S = \hat{\mathbf{x}}_{k|k} + C_k \left[\hat{\mathbf{x}}_{k+1|k}^S - \hat{\mathbf{x}}_{k+1|k} \right] \quad (26)$$

$$P_{k|k}^S = P_{k|k} + C_k \left[P_{k+1|k}^S - P_{k+1|k} \right] C_k^T \quad (27)$$

Computational methods

All computations for validating the estimation and filtering strategies were performed using MatLab on a 1.6-GHz Intel Core Duo Processor with 1GB RAM. We solve Equation (12) using SQP as implemented in the medium-scale algorithm of *fmincon* function. For the successive integration of Equation (13) we use the algorithm *ode45* that is based on an explicit Runge-Kutta formula¹⁹.

The optimization problem of Equation (17) was solved using QP as implemented in the algorithm of *quadprog* function. The CEKF and CEKF&S algorithms implemented in MatLab are shown in the Appendices.

Case study

The computational case study is based on the ethanol production from glucose fermentation by *Zymomonas mobilis* bacteria. *Zymomonas mobilis* has attracted considerable interest over the past decades as a result of its unique metabolism and ability to rapidly and efficiently produce ethanol from simple sugars. However, despite its apparent advantages of higher yields and faster specific rates when compared to yeasts, little attention has been focused on *Zymomonas mobilis* for the ethanol production. In addition to ethanol, depending on the substrate, other fermentation products can occur, such as lactic acid, acetic acid, formic acid, acetone, and sorbitol. See Rogers *et al.*²⁰ for a detailed review.

Various models have been proposed to describe the oscillatory dynamics of continuous *Zymomonas mobilis* cultures^{21,22,23}. Since the Jöbbses's model²³ can predict a

branch with higher ethanol production, which has been experimentally confirmed (at least for low dilution rates) by Elnashaie *et al.*²⁴, we have decided to use this model as our case study.

Jöbses's model²³ is given by the following equations:

$$\frac{dC_S}{dt} = -\left(\frac{\mu_{\max} C_S C_e}{Y_{Sx}(K_S + C_S)}\right) - m_S C_x + D(C_{S0} - C_S) \quad (28)$$

$$\frac{dC_x}{dt} = \left(\frac{\mu_{\max} C_S C_e}{K_S + C_S}\right) + D(C_{x0} - C_x) \quad (29)$$

$$\frac{dC_e}{dt} = K_E (C_P - c_1)(C_P - c_2) \left(\frac{C_S C_e}{K_S + C_S}\right) + D(C_{e0} - C_e) \quad (30)$$

$$\frac{dC_P}{dt} = \left(\frac{\mu_{\max} C_S C_e}{Y_{Px}(K_S + C_S)}\right) - m_P C_x + D(C_{P0} - C_P) \quad (31)$$

where C_S is the substrate (glucose) concentration, C_x is the biomass (*Zymomonas mobilis*), C_P is the product (ethanol) concentration, and C_e is an auxiliary variable used to lag the effect of the ethanol concentration in the kinetic model. The polynomial $K_E (C_P - c_1)(C_P - c_2)$, experimentally adjusted in C_e description, makes possible the model to depict the oscillatory behaviors and have output multiplicity. The variables C_{S0} , C_{x0} , C_{e0} and C_{P0} complete the mass balance representing the states inputs in the reactor, normally only C_{S0} (substrate inlet) is not zero. The dilution rate (D) means the same as the inverse of the residence time. The reactor volume is kept constant and the other variables are listed in Table 1. More detailed description can be found in the Jöbses *et al.*²³.

Figure 4 shows the dynamic simulation (with $C_{S0} = 200 \text{ kg/m}^3$ and $D = 2.0 \text{ h}^{-1}$) of the product to different initial conditions: IC_1 ($C_S = 10 \text{ kg/m}^3$, $C_e = 9 \text{ kg/m}^3$, $C_x = 0.1 \text{ kg/m}^3$ and $C_P = 100 \text{ kg/m}^3$) and IC_2 ($C_S = 10 \text{ kg/m}^3$, $C_e = 9 \text{ kg/m}^3$, $C_x = 0.1 \text{ kg/m}^3$ and $C_P = 20 \text{ kg/m}^3$). A perturbation in the initial condition of C_P leads the system to converge to a different steady

state, indicating the occurrence of bistability. Such behavior characterizes the existence of multiple solutions.

Table 1: Jöbse's model parameters

Parameters	Values	Unity
k_3	0.00383	$\text{m}^6 \cdot \text{kg}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$
c_1	59.2085	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
c_2	70.5565	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
K_S	0.500	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
m_S	2.160	$\text{kg} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$
m_P	1.100	$\text{kg} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$
Y_{SX}, Y_{PX}	(0.02445, 0.05263)	$\text{kg} \cdot \text{kg}^{-1}$
μ_{\max}	1.0	h^{-1}

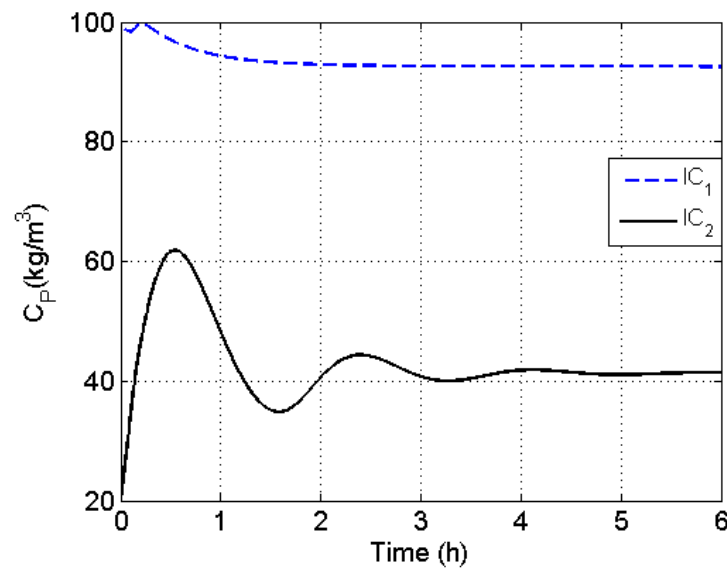


Figure 4: Jöbse's model dynamic simulation²³.

Note that IC_1 lead the system to a steady state of high ethanol production whereas IC_2 lead the system to a steady state of low ethanol production.

Results and analyses

Virtual analyzer and feedback control

A multivariable control strategy for *Zymomonas mobilis* bioreactor is proposed in Trierweiler and Diehl²⁵, where C_{S0} and D are the manipulated variables and C_P and C_S are the controlled variables. This structure provides flexibility to the system, allowing the maximization of substrate to product conversion. The frequency domain multivariable PI (proportional-integral) controller is shown in Equation (32), where the columns are (D, C_{S0}) and the rows are (C_P, C_S) , and the control sampling time of 1 minute was used.

$$PI = \begin{bmatrix} -0.016 \times \left(1 + \frac{1}{0.565s}\right) & 0.7077 \times \left(1 + \frac{1}{0.015s}\right) \\ 6.133 \times \left(1 + \frac{1}{0.8076s}\right) & 3.2102 \times \left(1 + \frac{1}{0.4393s}\right) \end{bmatrix} \quad (32)$$

The design of a state estimator assumes system observability, i.e., a set of measurements must provide enough information to estimate all the system states. Thus, a system observability analysis is necessary before applying the state estimation techniques.

According to the Popov-Bevelic-Hautus (PBH) criterion, the system (F, H) (Equations (3)-(4)) is state observable if and only if

$$M(i) = \begin{bmatrix} \lambda(i) & I - F \\ & H \end{bmatrix}; \quad \text{rank}[M(i)] = n \quad (33)$$

has rank n (full column rank) for all eigenvalues $\lambda_i (i = 1, 2, \dots, n)$ of matrix F ²⁶.

As result, the *Zymomonas mobilis* bioreactor system is observable if C_S is measured.

In this section, the CEKF is used as a virtual analyzer, filtering C_S (assumed to be a measured variable with random noise) and estimating the other states, including C_P . The filtered C_S and the estimated C_P are used to feedback the PI controller.

We consider state estimation with the following initial guesses and parameters:

$$x_0 = [1.24 \quad 4.74 \quad 13.31 \quad 92.56] \quad (34)$$

$$P_0 = 0.05^2 I_{4 \times 4} \quad (35)$$

$$\Delta t = t_k - t_{k-1} = 0.0167 \quad (36)$$

$$R = 1 \quad (37)$$

$$Q = 0.01^2 I_{4 \times 4} \quad (38)$$

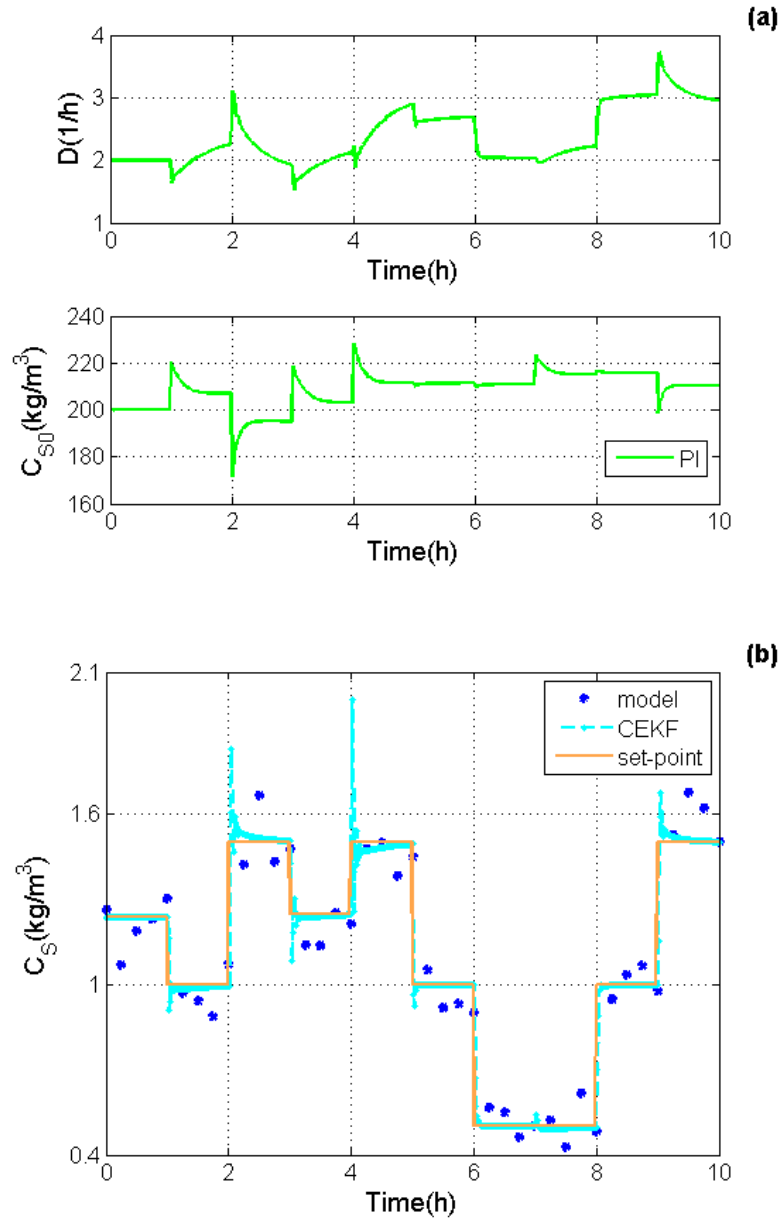
$$x_{\min} = [0.01 \quad 0.01 \quad 0.01 \quad 80] \quad (39)$$

$$x_{\max} = [10 \quad 20 \quad 50 \quad 110] \quad (40)$$

Typically in bioprocesses the concentrations are measured by techniques with inherent time delay. For instance, it is common to use high performance liquid chromatography (HPLC)²⁷, infrared²⁸ or Raman²⁹ spectroscopy. However some new methods, such as two-dimensional fluorescence spectroscopy³⁰ can reduce this pure time delay considerably. In our example we consider hence online measurements available each 20 minutes and without pure time delay.

The controller performance with CEKF feedback is shown in Figure 5. As the control and state estimation have different sampling times (1 and 20 minutes, respectively), the CEKF simulation model is called every 1 minute and the CEKF update step (with the new measurement) is called only each 20 minutes.

According to the results of Figure 5, the state estimation with CEKF guarantees a suitable performance of the PI controller.



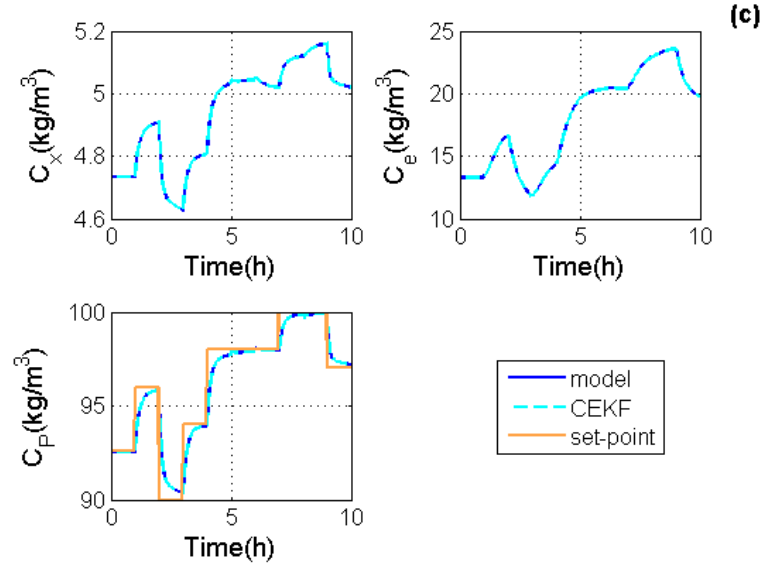


Figure 5: CEKF performance for feedback control: (a) manipulated variables, (b) measured controlled variable, (c) estimated states.

Parameters fitting and update

Here, we have chosen the parameter c_1 to be estimated together with the states and, thereby, the state vector x is augmented with this parameter to obtain an augmented state vector x' , i.e.

$$x' = \begin{bmatrix} x \\ c_1 \end{bmatrix} \quad (41)$$

As the parameter is constant then the augmented system model of Equations (1) and (2) can be rewritten as

$$\dot{x}' = \begin{bmatrix} f(x, u, t, c_1) \\ 0 \end{bmatrix} + \omega(t) \quad (42)$$

$$y_k = \begin{bmatrix} h(x_k, t_k) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_k \\ c_1 \end{bmatrix} + v_k \quad (43)$$

The common praxis of Equation (41) to augment the state vector definition to make possible a simultaneous state and parameter estimation is in general not recommended, since

the additional differential equation produces a local-state matrix F (Equation (3)) with corresponding row elements equal to zero. It makes more difficult to find a set of measurements for system observability, being usually necessary to include additional measurements.

As result of the new observability analysis (cf. Equation (33)), not only C_s but also C_p must be measured to make the augmented system (Equations (42) and (43)) observable.

Now we consider state estimation with the following initial guesses and parameters:

$$x'_0 = [8.78 \quad 4.55 \quad 9.63 \quad 89.05 \quad 56.25] \quad (44)$$

$$P_0 = 0.05^2 I_{5 \times 5} \quad (45)$$

$$\Delta t = t_k - t_{k-1} = 0.25 \quad (46)$$

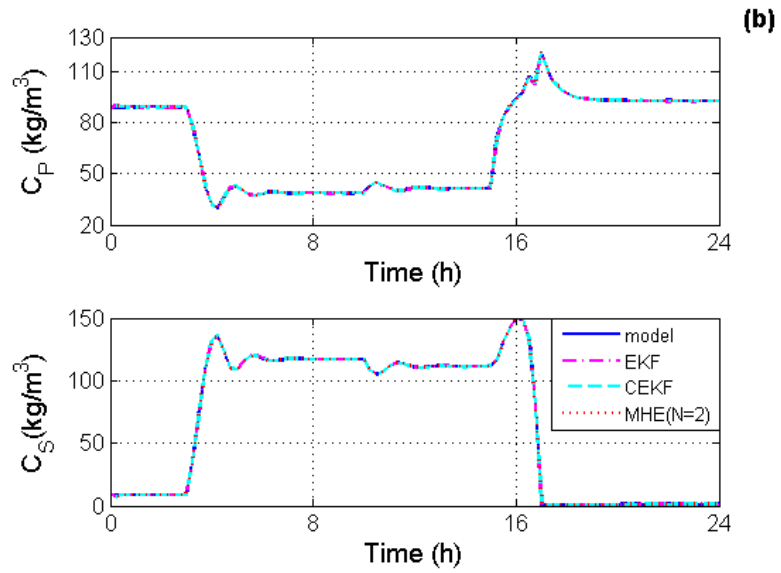
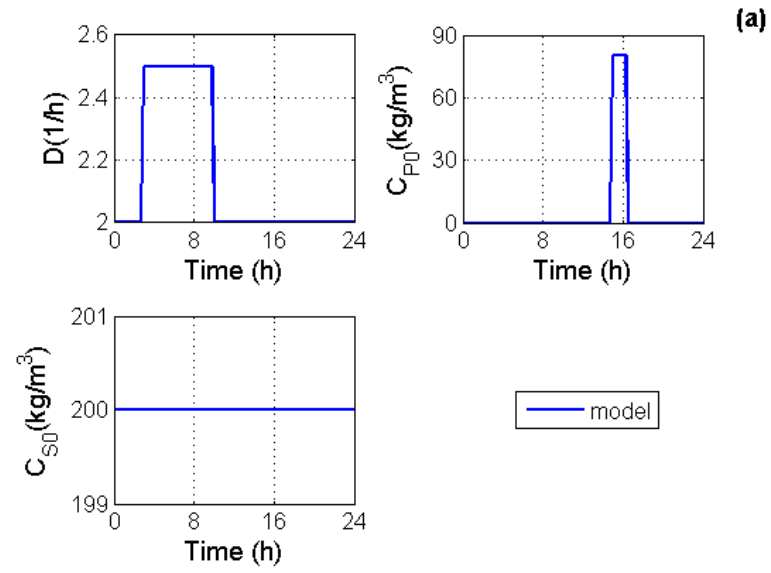
$$R = 0.1^2 I_{2 \times 2} \quad (47)$$

$$Q = 0.5^2 I_{5 \times 5} \quad (48)$$

$$x'_{\min} = [0.15 \quad 1.2 \quad 1.8 \quad 30 \quad 53.28] \quad (49)$$

$$x'_{\max} = [150 \quad 5 \quad 41 \quad 121 \quad 65.13] \quad (50)$$

In this case study, the dilution rate is increased from 2 h^{-1} to 2.5 h^{-1} at 5 h and then at 10 h again reduced to 2 h^{-1} . To bring the system to the steady state of high ethanol production we have applied a pulse in the inlet ethanol concentration (C_{P0}) at 15 h (cf. Figure 6a). Here we compare the performance of CEKF with MHE (using $N = 2$) and EKF, as shown in Figure 6.



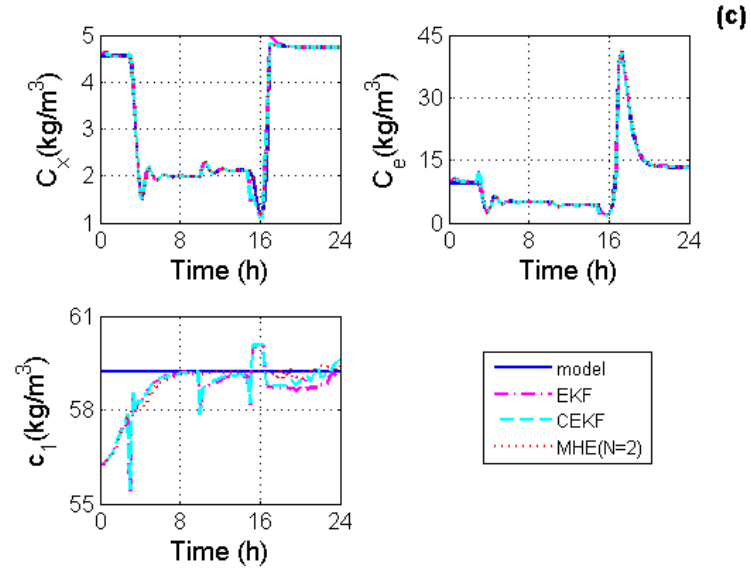


Figure 6: Comparison between EKF, CEKF and MHE ($N = 2$) performances for parameter estimation: (a) manipulated variables, (b) measured controlled variable (filtered measured state) and (c) estimated states.

The EKF, CEKF and MHE ($N = 2$) performances are evaluated using the Integral Time Absolute Error (ITAE) as shown in Table 2. Since no constraints are violated, the filters performances were quite similar. However, the MHE presents more accurate state estimatives at the price of high computational effort.

Table 2: Filters Performance for Parameter Estimation - ITAE Values

	C_x	C_e	c_1	average CPU time per time step (s)
EKF	13.0	43.7	120.1	0.03
CEKF	10.7	38.3	96.4	0.04
MHE ($N = 2$)	0.6	38.3	46.0	18.6

Transient data reconciliation

We can also augment the state vector x with new artificial parameters corresponding to the error in the variables to be reconciliated. Then, the same procedure as for the parameter estimation of the previous section can be applied, taking appropriate noise variances into account.

Supposing a leak in the process, it was considered an error of 2 h^{-1} in the manipulated dilution rate (ΔD) and no error in the manipulated inlet substrate concentration (ΔC_{S0}).

The augmented state vector is now given by:

$$x' = \begin{bmatrix} x \\ \Delta D \\ \Delta C_{S0} \end{bmatrix} \quad (51)$$

The augmented system model originated by the augmented state vector above is also observable with a set of measurements composed by C_s and C_p .

Again the dilution rate is increased from 2 h^{-1} to 2.5 h^{-1} at 5 h and then at 10 h again reduced to 2 h^{-1} and a pulse (C_{P0}) is applied at 15 h, as shown in Figure 6a.

Here we consider state estimation with the following poor state initial guesses \bar{x}'_0 and parameters:

$$\bar{x}'_0 = [111.34 \quad 2.11 \quad 4.24 \quad 41.29 \quad 0 \quad 0] \quad (52)$$

$$P_0 = 0.75^2 I_{6 \times 6} \quad (53)$$

$$\Delta t = t_k - t_{k-1} = 0.25 \quad (54)$$

$$R = 0.1^2 I_{2 \times 2} \quad (55)$$

$$Q = \text{diag}(0.05^2 \quad 0.05^2 \quad 0.05^2 \quad 0.05^2 \quad 0.1^2 \quad 0.1^2) \quad (56)$$

$$x'_{\min} = [0.15 \quad 1.2 \quad 1.8 \quad 30 \quad -5 \quad 0] \quad (57)$$

$$x'_{\max} = [150 \quad 5 \quad 41 \quad 121 \quad 0 \quad 0] \quad (58)$$

As the location of the leak is unknown to the estimator, we design the estimator with a process-noise covariance for ΔD and ΔC_{S0} equal to the measurement-noise covariance. Also in this case, we compare the performance of CEKF with MHE (using $N = 2$) and EKF, as shown in Figure 7. Again the filters performances are evaluated using the ITAE as can be seen in Table 3.

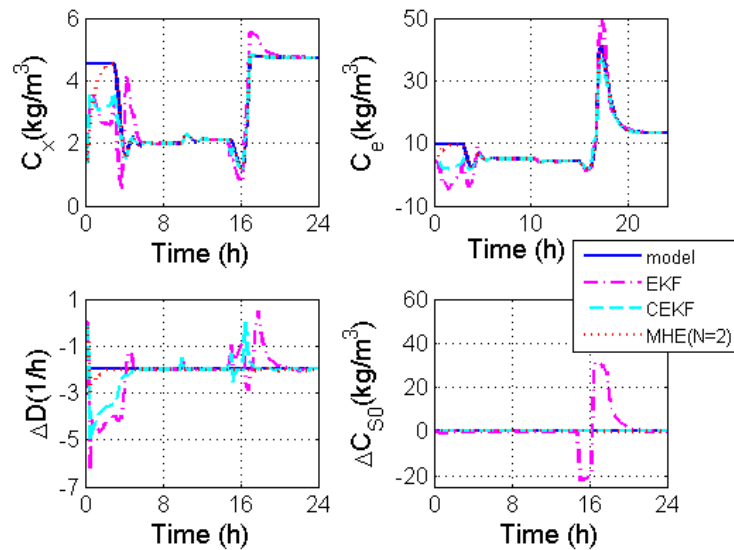


Figure 7: Comparison between EKF, CEKF and MHE ($N = 2$) performances for transient data reconciliation: estimated states.

According to the results of Figure 7, MHE and CEKF provide a good estimate of the total losses for the leak, identifying the error in ΔD , and that there is no error in ΔC_{S0} (due to the constraints). On the other hand, EKF cannot provide such good estimates due to constraint violation. Although it seems to make no sense to reconcile a flow rate with upper and lower bounds equal to zero (for instance ΔC_{S0}) this strategy is useful if one has modeled all leak possibilities (ΔD and ΔC_{S0}), but rather uses one (ΔD) or more leak possibilities among them, i.e., a different scenario.

MHE presents again the best performance and swifter converge to actual states. Further, MHE provides improved state estimation and greater robustness to poor guesses of

the initial state, as shown in Table 3. However, after the convergence towards the actual states, both MHE and CEKF perform equally accurately.

To improve the CEKF performance when the system is subjected to poor state initial guesses, we have applied the CEKF&S only in the beginning of the estimation problem (cf. Figure 7), using the first $N + 1$ measurements. Figure 8 shows the comparison between the CEKF&S performances using three different horizon sizes. As expected, the performance of CEKF&S improves as the horizon size increases.

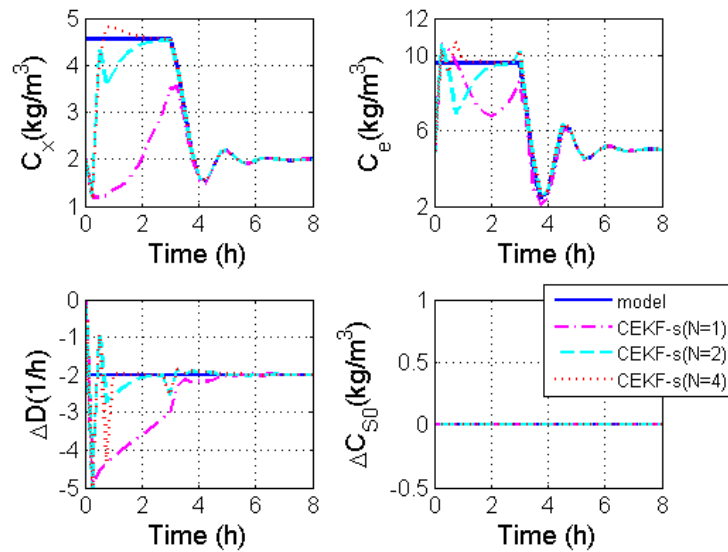


Figure 8: Comparison between CEKF&S performances using three different horizon sizes for transient data reconciliation: estimated states until $t = 8$ h.

A fair comparison between CEKF&S and MHE requires that the same information is available to both estimators. Thus, we compare in Figure 9 these formulations using a horizon size of $N = 2$, i.e., considering three measurements of each measured state.

Accordingly to Figure 9, the CEKF&S can also converge swifter to the actual states, with much smaller computational effort, as shown in Table 3.

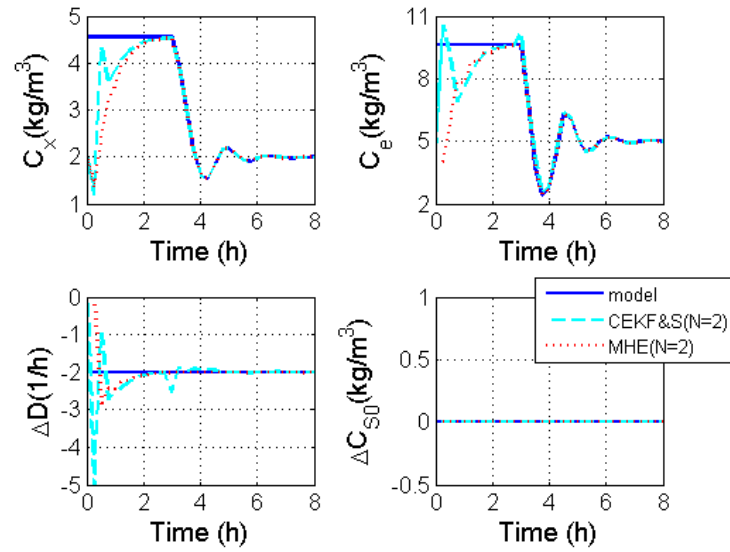


Figure 9: Comparison between CEKF&S and MHE performances using a horizon size of $N = 2$: estimated states until $t = 8$ h.

Table 3: Filters Performance for Data Reconciliation - ITAE Values

	C_x	C_e	ΔD	ΔC_{S0}	average CPU time per time step (s)
EKF	59.8	240.8	95.6	1553	0.04
CEKF	12.8	146.6	34.2	0	0.04
CEKF&S ($N=2$)	6.0	108.6	24.8	0	0.04
MHE ($N=2$)	2.1	17.4	6.7	0	23

Conclusions

In this paper we have shown the advantages of using state estimators as a tool for better operation of a *Zymomonas mobilis* bioreactor. Based on this illustrative example and on many other case studies presented elsewhere, the following conclusions can be formulated:

- State estimators can be successfully applied for process monitoring and feedback control because they provide information on unmeasured state which is essential to ensure proper operation of any plant.

- This tool can also be used to fit and update parameters and to reconcile the transient data. However, the strategy of augmenting the state vector with new variables may become more difficult to find a set of measurements to guarantee the system observability, being usually necessary to include additional measurements, as it was illustrated by the inclusion of C_p measurement in the *Zymomonas mobilis* bioreactor case study.
- In general the EKF formulation has worse performance when compared with CEKF and MHE strategies;
- MHE can improve state estimation and provide better robustness to poor guesses of the initial state. However, after the convergence towards the actual states, both MHE and CEKF perform equally accurately and, therefore, the use of MHE becomes needless.
- The better relationship between performance and practical application is obtained with the CEKF formulation, because it requires small computational effort than MHE with comparable performance. Therefore, we recommend using CEKF as first choice. The Appendix 1 illustrates how a CEKF can be easily implemented.
- Here it was proposed a CEKF formulation with RTS smoother. The CEKF&S can be seen as an efficient solution for the poor guesses of the initial state problem because it permits one to estimate past values based on all available measurements. The CEKF&S implementation is illustrated in Appendix 2.

Acknowledgements

The authors would like to thank the financial support from DAAD, PETROBRAS S.A and CNPq.

Appendix 1 (Implementation of CEKF using MATLAB language)

The CEKF algorithm for state estimation can be carried out by the steps below:

1. Simulate the model from t_{k-1} to t_k (Δt) to obtain (Equation (1)).

```
[tk,xkk_1]=ode45(Model,[0 delta_t], xk_1k_1);
```

2. Compute the linear models F (Equation (3)) and H (Equation (4)) at t_k .

```
n=length(xkk_1);
ny=length(y);
for i=1:n,
    for j=1:n,
        if i~=j,
            F(i,j)=diff(dxdt(i),'x(j)');
        else
            F(i,i)=diff(dxdt(i),'x(i)');
        end
    end
end

for i=1:ny,
    for j=1:n,
        H(i,j)=diff(y(i),'x(j)');
    end
end
```

3. Calculate the state transition matrix φ_{k-1} for the state at t_k (Equation (8)).

```
phi=expm(F*delta_t);
```

4. Compute the state covariance matrix (Equation (11)).

```
Pkk=phi*Pk_1k_1*(phi)'
```

```
phi*Pk_1k_1*(H)*inv(H*Pk_1k_1*(H)+R)*H*Pk_1k_1*(phi)+Q;
```

5. Solve the CEKF optimization problem (Equation (17)) subject to equality (Equation (19)) and inequality (Equation (20)) constraints using QP to obtain $\omega_{k-1|k}$ and $v_{k|k}$:

```
T=[inv(Pk_1k_1) zeros(n,ny);zeros(ny,n) inv(R)];
T=(T+T')/2;
wmin=xmin-xkk_1;
wmax=xmax-xkk_1;
vmin=H*xmin-H*xkk_1;
vmax=H*xmax-H*xkk_1;
opt=optimset('LargeScale','off');
w_v=quadprog(T,zeros(n+ny,1),[],[],[H eye(ny)],[y(:)-H*xkk_1],[wmin vmin],...
```



```
[wmax vmax], w_v0,opt);
```

7. Finally, compute the update state and measurement.

```
w=w_v (1:n);
v=w_v (n+1:n+ny);
xkk= xkk_1+w(:);
yk= H*xkk_1+v(:);
```

8. Repeat this procedure until the final time.

Appendix 2 (Implementation of the Smoother Procedure of CEKF&S)

The CEKF&S algorithm for state estimation can be carried out by the steps below:

1. Selected the horizon size (N) and perform the CEKF algorithm (as described in Appendix 1) for N sampling times.

2. Compute $\hat{x}_{N|k}^S$ and $P_{N|k}^S$.

```
xSkk(:,N)=xkk(:,N);
PSkk(:,N)=Pkk(:,N);
```

3. Solve the Equations (23) to (27) as below.

```
for i=(N-1):-1:1,
    [tk,xk+1k(:,i)]=ode45(Model,[0 delta_t], xkk(:,i);
    Pk+1k(:,i)=phi(:,i)* Pkk(:,i)* phi(:,i)' + Q;
    C(:,i) = (Pk+1k(:,i)* phi(:,i)')/Pk+1k(:,i);
    xSkk(:,i)=xkk(:,i)+C(:,i)*(xSkk(:,i+1)-xk+1k(:,i));
    PSkk(:,i)=Pkk(:,i)+C(:,i)*(PSkk(:,i+1)-Pk+1k(:,i))* C(:,i)';
end
```

4. Set new initial guesses:

```
x00= xSkk(:,1);
P00= PSkk(:,1);
```

5. Perform again the CEKF algorithm until the final time.

References

1. Alford JS, Bioprocess control: Advances and challenges. *Computers and Chemical Engineering*, **30**: 1464-1475 (2006).
2. Aynsley M, Holfland A, Morris AJ, Montague GA and Di Massimo C, *Artificial Intelligence and the Supervision of Bioprocesses (Real-Time Knowledge-Based Systems and Neural Networks)*. *Bioprocess Design and Control*. Springer-Verlag Berlin & Heidelberg, Berlin (1993).
3. Rani KY and Rao RVS, Control of fermenters – a review. *Bioprocess Engineering*, **21**: 77-88 (1999).
4. Bakhtadze NN, Virtual Analyzers: Identification Approach. *Automation and Remote Control*, **65(11)**: 1691-1709 (2004).
5. Gadkar KG, Mehra S and Gomes J, On-line adaptation of neural networks for bioprocess control. *Computers and Chemical Engineering*, **29**: 1047-1057 (2005).
6. Gonzalez GD, Soft Sensors for Processing Plants. *Proceedings of 2nd International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing of Materials*, Hawaii (1999).
7. Gesthuisen R, Klatt K-U and Engell S, Optimization-Based State Estimation - A Comparative Study for the Batch Polycondensation of PET. *Proceedings of ECC 2001*, Porto (2001).
8. Engell S, Feedback Control for Optimal Process Operation. *Journal of Process Control*, **17**: 203-219 (2006).
9. Simon D, *Optimal State Estimation: Kalman, H Infinity, and Nonlinear Approaches*, Wiley-Interscience, Hoboken (2006).
10. Soroush M, State and Parameter Estimations and their Applications in Process Control. *Computers and Chemical Engineering*, **23(2)**: 229-245 (1998).

11. Narasimhan S and Jordache C, *Data Reconciliation & Gross Error Detections: An Intelligent Use of Process Data*, Gulf Professional Publishing, Houston (2000).
12. Rao CV and Rawling JB, Constrained Process Monitoring: Moving-Horizon Approach. *AIChE Journal*, **48(1)**: 97-109 (2002).
13. Muske KR and Rawlings JB, *Nonlinear Moving Horizon State Estimation. NATO ASI Series v. 293*. Kluwer Academic, The Netherlands (1994).
14. Robertson DG, Lee JH, and Rawlings JB, A moving horizon-based approach for least-squares estimation. *AIChE Journal*, **42(8)**: 2209-2224 (1996).
15. Rao CV, Rawlings JB and Mayne DQ, Constrained State Estimation for Nonlinear Discrete-Time Systems: Stability and Moving Horizon Approximations. *IEEE Trans. Autom. Control*, **48(2)**: 246-258 (2003).
16. Salau NPG, Trierweiler JO and Secchi AR, Numerical Pitfalls by State Covariance Matrix Computation. *Submitted to Industrial & Engineering Chemistry Research* (2009).
17. Rauch HE, Tung F and Striebel CT, Maximum Likelihood Estimates of Linear Dynamic Systems. *AIAA Journal*, **3(8)**: 1445-1450 (1965).
18. Haykin S, *Kalman Filtering and Neural Networks*. John Wiley & Sons, New York (2001).
19. Shampine L and Reichelt M, The MATLAB ODE Suite. *SIAM Journal on Scientific Computing*, **18**: 1-22 (1997).
20. Rogers P, Jeon, Y, Lee K and Lawford H, *Zymomonas Mobilis for Fuel Ethanol and Higher Value Products. Biofuels*. Springer Berlin & Heidelberg, Berlin (2007).
21. Daugulis AJ, Mclellan PJ and Li J, Experimental Investigation and Modeling of Oscillatory Behaviour in the Continuous Culture of *Zymomonas mobilis*. *Biotechnology and Bioengineering*, **1**: 99-105 (1997).
22. Jarzebski AB, Modelling of Oscillatory Behaviour in Continuous Ethanol Fermentation. *Biotechnology Letters*, **2**: 137-142 (1992).

23. Jöbses IML, Egberts GTC, Luyben KCAM and Roels JA, Fermentation Kinetics of *Zymomonas Mobilis* at High Ethanol Concentrations: Oscillations in Continuous Cultures. *Biotechnology and Bioengineering*, **28(6)**: 868-877 (1986).
24. Elnashaine SSEH, Chen Z, Garhyan P, Prasad P and Maheca-Botero A, Practical Implications of Bifurcation Chaos in Chemical and Biological Reaction Engineering. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, **4** (2006).
25. Trierweiler JO and Diehl FC, Analysis, control, and operational optimization of a *Zymomonas mobilis* reactor with equilibrium multiplicity. *Proceedings of ADCHEM 2009*, Istanbul (2009).
26. Sontag ED. *Mathematical Control Theory: Deterministic Finite Dimensional Systems*, 2nd Edition, Springer, New York (1998).
27. Davis L, Rogers P, Pearce J and Peiris P, Evaluation of *Zymomonas*-Based Ethanol Production from a Hydrolyzed Waste Starch Stream. *Biomass and Bioenergy*, **30**: 809-814 (2006).
28. Mazarevica G, Diewok J, Baena JR, Rosenberg E and Lendl B, On-Line Fermentation Monitoring by Mid-Infrared Spectroscopy. *Society for Applied Spectroscopy*, **58**: 804-810 (2004).
29. Shaw AD and Kell JJ. Noninvasive On-Line Monitoring of the Biotransformation by Yeast of Glucose to Ethanol Using Dispersive Raman Spectroscopy and Chemometrics. *Society for Applied Spectroscopy*, v. **53**: 1419-1428 (1999).
30. Haltelmann K, Kollecker M, Hüll D, Hitzmann B and Scheper T. Two-Dimensional Fluorescence Spectroscopy: A Novel Approach for Controlling Fed-Batch Cultivations. *Journal of Biotechnology*, **121**: 410-417 (2006).

Capítulo 5

Issues on State Covariance Matrix Computation for Nonlinear Systems

Artigo submetido para publicação no periódico *Industrial & Engineering Chemistry Research*.

Resumo: A robustez numérica das matrizes de covariância dos estados de três formulações sem restrição e uma formulação com restrição do EKF (CEKF) é discutida neste artigo. Para tanto, estas formulações foram aplicadas em dois exemplos da engenharia química que apresentam multiplicidade de soluções: a) um reator batelada com reações reversíveis (Haseltine & Rawlings, 2005) no qual a relação entre o modelo e as medidas do sistema produz múltiplos estados que satisfazem a condição de equilíbrio e b) um reator CSTR com reações exotérmicas irreversíveis e balanço de energia da camisa de resfriamento (Torres & Tlacuahuac, 2000) no qual o comportamento não-linear inclui múltiplos estados estacionários e ciclos limites. Mesmo que as formulações do EKF sem restrição sejam constringidas por uma estratégia de corte (clipping) que evita estados indesejáveis, os resultados mostraram que o CEKF é, em geral, a melhor escolha entre as formulações do EKF para tais estudos de casos. Ao contrário da formulação do EKF com estratégia de corte (*clipped* EKF), o CEKF incorpora as restrições em um problema de otimização que minimiza o ruído em termos de mínimos quadrados, preservando a sua gaussianidade e evitando que este seja mal distribuído. Os resultados também mostraram que, embora a MHE forneça maior robustez para estimativas ruins dos estados iniciais, convergindo mais rapidamente para os estados reais, esta formulação não é justificada para os estudos de caso em questão devido ao elevado custo computacional.

Issues on State Covariance Matrix Computation for Nonlinear Systems

Nina P. G. Salau^{1}, Jorge O. Trierweiler¹ and Argimiro R. Secchi²*

1- GIMSCOP - Chemical Engineering Department, Federal University of Rio Grande do Sul, R. Eng. Luiz Englert, s/nº, CEP: 90040-040, Porto Alegre, Brazil

2- PEQ – COPPE - Federal University of Rio de Janeiro, CP: 68502, CEP: 21945-970,
Rio de Janeiro, Brazil

* Correspondence concerning this article should be addressed to N. P. G. Salau at ninas@enq.ufrgs.br.

ABSTRACT. A well-evaluated state covariance matrix avoids error propagation due to numerical pitfalls and, thereby, it is crucial for a successful state estimator design. In this paper we investigate the numerical robustness of the state covariance matrices used in three unconstrained Extended Kalman Filter (EKF) formulations and one constrained EKF formulation (CEKF). As benchmark case studies we have chosen: a) a batch chemical reactor with reversible reactions whose system model and measurement are such that multiple states satisfy the equilibrium condition and b) a CSTR with exothermic irreversible reactions and cooling jacket energy balance whose nonlinear behavior includes multiple steady-states and limit cycles. The results have shown that CEKF is in general the best choice of EKF formulations (even if they are constrained with an ad hoc clipping strategy which avoids undesired states) for such case studies. Contrary to a clipped EKF formulation, CEKF incorporates constraints into an optimization problem, which minimizes the noise in a least square sense preventing from bad noise distribution. It is also shown that although the Moving Horizon Estimation (MHE) provides greater robustness to poor guess of the initial state, converging faster to the actual states, it is not justified for our examples due to the high additional computational effort.

Keywords: nonlinear state estimation, state covariance matrix, noise distribution, multiple solutions.

Introduction

It is well known that a suitable design of state estimators requires a representative model for capturing the plant behavior and knowledge about the noise statistics, which are generally not known in practical applications.^{1,2} However, some pitfalls such as numerical round-off,

plant-model mismatch, and state unobservability deserve also special attention because they can lead to convergence failures.^{3,4,5} Any state covariance matrix equation is composed by states, measurements, linear models and noise covariance statistics and, hence, all the mentioned pitfalls may increase the error propagation conveyed by this matrix. In the literature, several modified implementations of the EKF are presented in an effort to avoid numerical pitfalls⁴. The basic difference between these formulations is concerned with the state covariance matrix computation. We can also find in the literature some contributions which show examples and outline conditions where other methods perform better than the standard EKF, MHE for instance.^{6,7} Otherwise, these works address comparison issues such as accuracy and computational expenses and no efforts are made to avoid numerical pitfalls by EKF state covariance matrix computation and thereby improve the filter performance.

Owing to the lack in literature concerning this problem, we investigate in this paper the numerical robustness of four EKF formulations, being three unconstrained: (i) classical EKF formulation called here as discrete EKF (DEKF), (ii) EKF with the continuous Riccati equation (EKF-CRE) and (iii) reduced-rank extended Kalman filter (RREKF); and a constrained EKF (CEKF) formulation⁸ to derive some results with systems tending to multiple solutions and limit cycles giving insights into their numerical performance.

In the next section we briefly review the state estimation formulations of interest. Afterwards, we present two systems tending to multiple solutions and outline conditions that lead to a classical EKF formulation to converge to physically unrealizable equilibrium points and to an undesired steady-state. Then, we demonstrate the potentiality of EKF-CRE and RREKF to handle with the numerical pitfalls by state covariance matrix computation. Otherwise, both formulations may not prevent from undesired states before eventually converging to the actual states. Although an ad hoc clipping strategy seems to be a reasonable

solution to constrain the states, it disregards the assumption that the measurement noise is a Gaussian random noise.

Finally, we have shown that CEKF is in general the best alternative to EKF formulations due to the possibility of incorporating constraints into an optimization problem preventing, hence, the estimator from converging to undesired states and from bad noise distribution. Furthermore, this technique demands a small computational effort and a performance comparable to the MHE.

Formulation and solution of the estimation problem

Consider the following nonlinear dynamic and continuous-time system with discrete-time measurements to be used in the state estimation formulations

$$\dot{x} = f(x, u, t) + \omega(t) \quad (1)$$

$$y_k = h_k(x_k, t_k) + \nu_k \quad (2)$$

$$\omega(t) \sim (0, Q) \quad (3)$$

$$\nu_k \sim (0, R_k) \quad (4)$$

where u denotes the deterministic inputs, x denotes the states, and y denotes the measurements. The process-noise vector, $\omega(t)$, and the measurement-noise vector, ν_k , are

assumed to be white Gaussian random process with zero mean and covariance Q and R_k , respectively.

The system is linearized at each time step to obtain the local state-space matrices as below:

$$F_k = \left(\frac{\partial f_k}{\partial x} \right)_{\hat{x}_{k|k-1}} \quad (5)$$

$$H_k = \left(\frac{\partial h_k}{\partial x} \right)_{\hat{x}_{k|k-1}} \quad (6)$$

The filter algorithm is initialized by the initially expected state and state covariance:

$$\hat{x}_{0|0} = E[x(0)] \quad (7)$$

$$P_{0|0} = E\left[(x(0) - \hat{x}_{0|0})(x(0) - \hat{x}_{0|0})^T \right] \quad (8)$$

Unconstrained EKF formulations

The equations that compose the different steps in the considered unconstrained EKF formulations are given below.

State transition equation:

$$\hat{x}_{k|k-1} = \hat{x}_{k-1|k-1} + \int_{k-1}^k f(\hat{x}, u, \tau) d\tau \quad (9)$$

Kalman gain equation:

$$K_k = P_{k|k-1} H_k^T \left[H_k P_{k|k-1} H_k^T + R_k \right]^{-1} \quad (10)$$

State update equation:

$$\hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + K_k \left[y_k - h(\hat{x}_{k|k-1}, t_k) \right] \quad (11)$$

The basic difference of these formulations is concerned with the state covariance matrix computation, as described below.

Discrete Extended Kalman Filter

DEKF considers discrete-time dynamics and discrete-time measurements. This situation is often encountered in practice. Even if the underlying system dynamics are continuous-time, the state estimator usually needs to be implemented in a digital computer.⁵

The nonlinear dynamic system in continuous time (cf. eq 1) can be approximated by a linear dynamic system in continuous time expressed in a general form as a first-order vector of difference equation.^{3, 4, 5}

$$x_k = \varphi_{k-1} x_{k-1} + \omega_{k-1} \quad (12)$$

where φ_{k-1} is the *state transition matrix* for the state at time t_k given as

$$\varphi_{k-1} = e^{F(t_k - t_{k-1})} \quad (13)$$

According to Nicholas,⁹ the scaling and squaring method is the most widely used method for computing the exponential matrix, not least because it is the method implemented in MatLab. The built-in MatLab's *expm* function combines scaling and squaring with a Padé approximation for the exponential of the scaled matrix, and it is designed to achieve a specified tolerance of the approximation error.

The state covariance matrix transition equation of the DEKF is given by

$$P_{k|k-1} = \varphi_{k-1} P_{k-1|k-1} \varphi_{k-1}^T + Q_{k-1} \quad (14)$$

and the state covariance matrix update equation can be represented by one of the following equations:

$$P_{k|k} = [I_n - K_k H_k] P_{k|k-1} [I_n - K_k H_k]^T + K_k R_k K_k^T \quad (15)$$

$$P_{k|k} = P_{k|k-1} - P_{k|k-1} H_k^T [H_k P_{k|k-1} H_k^T + R_k]^{-1} H_k P_{k|k-1} \quad (16)$$

$$P_{k|k} = [I_n - K_k H_k] P_{k|k-1} \quad (17)$$

The first equation (eq 15) called Joseph form^{3, 4, 5} has somewhat better numerical behavior than the other forms in unusual numerical situations.³ Since it guarantees that $P_{k|k}$ will always be symmetric positive definite, as long as $P_{k|k-1}$ is symmetric positive definite, and K_k does

not need to be optimal. The third equation for $P_{k|k}$ (eq 17) is computationally simpler than the first equation, but its form does not guarantee symmetry or positive definiteness for $P_{k|k}$.⁵ However, we have formulated the DEKF using the eq 17 for comparison with the reference of our first case study.⁸ Equation 16 is just the substitution of eq 10 in eq 17.

Reduced Rank Extended Kalman Filter

RREKF is motivated by data assimilation problems, i.e., assimilating observations into numerical models. It was firstly applied to the problem of data assimilation in meteorology¹⁰ and later in oceanography (or in geophysical sciences generally).¹¹ In general, data assimilation is seen as the means of obtaining a consistent picture of a geophysical system optimally blending all the information available on this system. This information may consist of data of all types, of varying accuracy and geographical distribution, and also of information derived from the theoretical knowledge already possessed on the system expressed in terms of physical laws, either deterministic or statistical, and therefore via various forms of models.¹¹

RREKF development consists essentially of approximating the error covariance matrix by a singular low rank matrix, which amounts in practice to making no correction in those directions for which the error is the most attenuated by the system. It is made by expressing the transition state covariance matrix in terms of its dominant eigenvectors. Neglecting non-dominant eigenvectors of the covariance matrix implies that the dimensionality of the confidence region is reduced. Measurement updates have therefore no effect in directions of non-dominant eigenvectors. If the actual state does not leave the attractor, the RREKF is advantageous since measurement updates are omitted in those directions of strongest

attraction. Furthermore, this EKF modification is more robust against improper initialization as claimed by Tuan Pham et al.¹¹

Although the RREKF is not applied or at least barely applied to chemical processes, we have selected this formulation to show the benefits of a lower rank covariance approximation of the transition state covariance matrix (eq 14) in the examples we are interested in. Except by this modification, RREKF presents the same formulation as for DEKF.

We briefly outline implementation and implications of low-rank covariance approximation. Let $V_{P,k}$ comprise the eigenvectors $\mathbf{v}_{P,i}$ of $P_{k|k-1}$ as columns and $\Lambda_{P,k}$ the corresponding eigenvalues $\lambda_{P,i}$ on the diagonal. As the transition state covariance matrix (eq 14) is symmetric it can be decomposed as

$$P_{k|k-1} = V_{P,k} \Lambda_{P,k} V_{P,k}^T = \sum_{i=1}^n \lambda_{P,i} \mathbf{v}_{P,i} \mathbf{v}_{P,i}^T \quad (18)$$

For $|\lambda_{P,1}| < |\lambda_{P,2}| < \dots < |\lambda_{P,n}|$, the rank $q < n$ approximation of the covariance matrix is given by

$$P_{q,k|k-1} = \sum_{i=1}^q \lambda_{P,i} \mathbf{v}_{P,i} \mathbf{v}_{P,i}^T \quad (19)$$

Geometrically, lower-rank approximation is the orthogonal projection of the covariance ellipse or (hyper-)ellipsoid onto its q most dominant axes.

Extended Kalman Filter with the Continuous-Time Riccati Equation

In this section we introduce an EKF formulation referred as EKF with the continuous-time Riccati equation (EKF-CRE).

Before we define the EKF-CRE, a brief review about an alternate form for the EKF which applies the discrete-time Riccati equation (DRE) is necessary.⁵ This approximation referred here as EKF-DRE is computationally attractive because the state covariance matrix, P , is evaluated just once at each time step, i.e., the state covariance matrix transition and update steps are carried out simultaneously.

Considering eq 16 for the state covariance matrix update, rewritten here by convenience

$$P_{k|k} = P_{k|k-1} - P_{k|k-1} H_k^T \left[H_k P_{k|k-1} H_k^T + R_k \right]^{-1} H_k P_{k|k-1} \quad (20)$$

Applying eq 14 considering the next time steps, we can write the state covariance matrix transition as follows:

$$P_{k+1|k} = \varphi_k P_{k|k} \varphi_k^T + Q_k \quad (21)$$

Substituting eq 20 into this eq 21 gives

$$P_{k+1|k} = \varphi_k \left(P_{k|k-1} - P_{k|k-1} H_k^T \left[H_k P_{k|k-1} H_k^T + R_k \right]^{-1} H_k P_{k|k-1} \right) \varphi_k^T + Q_k \quad (22)$$

Rearranging eq 22 and assuming that $P_{k+1|k+1} = P_{k+1|k}$, we obtain the equation for one-step state covariance matrix equation

$$P_{k+1|k+1} = \varphi_k P_{k|k} \varphi_k^T - \varphi_k P_{k|k} H_k^T \left[H_k P_{k|k} H_k^T + R_k \right]^{-1} H_k P_{k|k} \varphi_k^T + Q_k \quad (23)$$

Now, rewriting eq 23, considering one time step before, we arrive into the formulation called DRE

$$P_{k|k} = \varphi_{k-1} P_{k-1|k-1} \varphi_{k-1}^T - \varphi_{k-1} P_{k-1|k-1} H_k^T \left[H_k P_{k-1|k-1} H_k^T + R_k \right]^{-1} H_k P_{k-1|k-1} \varphi_{k-1}^T + Q_{k-1} \quad (24)$$

Note that the Kalman gain (eq 10) requires $P_{k|k-1}$ and this term is not computed in this alternate EKF formulation. Thus, eq 10 can be modified assuming that $P_{k|k-1} = P_{k-1|k-1}$, resulting in

$$K_k = P_{k-1|k-1} H_k^T \left[H_k P_{k-1|k-1} H_k^T + R_k \right]^{-1} \quad (25)$$

In spite of applying one-step state covariance matrix equation and using a different equation for the Kalman gain, the EKF-DRE and the DEKF result in identical results and estimation-error covariances.⁵ To avoid a redundancy, the EKF-DRE will be not compared in our examples.

Alternatively, following the same steps we can write a similar expression for the continuous case, which can be written as following:

$$P_{k|k} = P_{k-1|k-1} + \int_{k-1}^k \begin{bmatrix} F(\tau)P(\tau) + P(\tau)F(\tau)^T + Q(\tau) \\ -P(\tau)H(\tau)^T R(\tau)^{-1} H(\tau)P(\tau) \end{bmatrix} d\tau \quad (26)$$

The equation above is known as continuous-time Ricatti equation (CRE). It is equivalent to the state covariance matrix transition equation of the continuous-time EKF found in literature.^{3, 4, 5} The basic difference between both formulations is concerned with the Kalman gain equation. For the continuous-time EKF, the Kalman gain equation considers that the measurement values remain constant during the entire time interval, which is suitable just for small sampling times. Furthermore, the EKF-CRE considers continuous-time dynamics and discrete observation for update, i.e., discrete-time measurements.

Moving Horizon Estimator (MHE)

Before explaining the CEKF formulation, the basic aspects about the MHE^{12,13,14} is presented. The basic idea of MHE is to proceed with state estimation by using only the most recent $N+1$ measurements, where N is the time horizon size.

The moving horizon approximation of the objective function is given by

$$\min_{\substack{\omega_{k-N|k}, \dots, \omega_{k-1|k} \\ v_{k-N|k}, \dots, v_{k|k}}} \Psi_k^N = \left[\begin{array}{l} \hat{\omega}_{k-N-1|k}^T (P_{k-N-1|k-1})^{-1} \hat{\omega}_{k-N-1|k} \\ + \sum_{j=k-N}^{k-1} \hat{\omega}_{j|k}^T (Q_{k-1})^{-1} \hat{\omega}_{j|k} + \sum_{j=k-N}^k \hat{v}_{j|k}^T (R_k)^{-1} \hat{v}_{j|k} \end{array} \right] \quad (27)$$

subject to the equality constraints

$$\begin{aligned} \hat{x}_{k-N|k} &= \hat{x}_{k-N|k-1} + \hat{\omega}_{k-N-1|k} \\ \hat{x}_{j+1|k} &= \int_j^{j+1} f(\hat{x}, u, \tau) d\tau + \hat{\omega}_{j|k}, \quad j = k-N, \dots, k-1 \\ y_j &= h(\hat{x}_{j|k}) + \hat{v}_{j|k}, \quad j = k-N, \dots, k \end{aligned} \quad (28)$$

and the inequality constraints

$$\begin{aligned}
 x_{\min} &\leq \hat{x}_{j|k} \leq x_{\max} \\
 \hat{\omega}_{\min} &\leq \hat{\omega}_{j-1|k} \leq \hat{\omega}_{\max}, \quad j = k - N, \dots, k \\
 \hat{v}_{\min} &\leq \hat{v}_{j|k} \leq \hat{v}_{\max}, \quad j = k - N, \dots, k
 \end{aligned} \tag{29}$$

From optimization, measurements and states are updated as follows

$$\begin{aligned}
 \hat{x}_{k-N|k} &= \hat{x}_{k-N|k-1} + \hat{\omega}_{k-N-1|k}^* \\
 \hat{x}_{j+1|k} &= \int_j^{j+1} f(\hat{x}, u, \tau) d\tau + \hat{\omega}_{j|k}^*, \quad j = k - N, \dots, k - 1 \\
 y_j &= h(\hat{x}_{j|k}) + \hat{v}_{j|k}^*, \quad j = k - N, \dots, k
 \end{aligned} \tag{30}$$

Rao et al.¹⁴ suggests computing the state covariance matrix equation $P_{k|k}^N$ (eq 31) recursively using the discrete Riccati equation. One obtains this result by deriving the deterministic Kalman filter using forward dynamic programming.¹⁵

$$P_{k|k}^N = \varphi_k P_{k-1|k-1}^N \varphi_k^T - \varphi_k P_{k-1|k-1}^N H_k^T \left[H_k P_{k-1|k-1}^N H_k^T + R_k \right]^{-1} H_k P_{k-1|k-1}^N \varphi_k^T + Q_k \tag{31}$$

Note that the equation above is the same as for eq 24 applied to each horizon step.

We solve eq 27 using sequential quadratic programming (SQP) as implemented in the medium-scale algorithm of *fmincon* function in MatLab. For the successive integration of eq 30 we use DASSLC (Differential-Algebraic System Solver in C) which does the multirate integration of systems of differential-algebraic equations (DAEs). The integration algorithm used in DASSLC is an extension of the DASSL code of Petzold¹⁶ to address high-index and

large-scale problems, and the setup algorithm used in DASSLC is based on the DAWRS code,¹⁷ a package to solve DAEs on parallel machines.

Constrained EKF

CEKF follows from the MHE when the horizon length is set to zero.⁸ Zero length implies that ODEs are not considered into the optimization problem, which simplifies the complexity of solving a nonlinear dynamic optimization problem.

Setting ($N=0$) into the MHE optimization problem (eq 27), the resulting formulation is exactly the CEKF formulation problem

$$\min_{\omega_{k-1|k}, v_{k|k}} \Psi_k = \left[\hat{\omega}_{k-1|k}^T (P_{k-1|k-1})^{-1} \hat{\omega}_{k-1|k} + \hat{v}_{k|k}^T (R_k)^{-1} \hat{v}_{k|k} \right] \quad (32)$$

subject to the equality constraints

$$\begin{aligned} \hat{x}_{k|k} &= \hat{x}_{k|k-1} + \hat{\omega}_{k-1|k} \\ y_k &= h(\hat{x}_{k|k}) + \hat{v}_{k|k} \end{aligned} \quad (33)$$

and inequality constraints

$$\begin{aligned} x_{\min} &\leq \hat{x}_{k|k} \leq x_{\max} \\ \hat{\omega}_{\min} &\leq \hat{\omega}_{k-1|k} \leq \hat{\omega}_{\max} \\ \hat{v}_{\min} &\leq \hat{v}_{k|k} \leq \hat{v}_{\max} \end{aligned} \quad (34)$$

From optimization, measurements and states are updated as follows

$$\begin{aligned}\hat{x}_{k|k} &= \hat{x}_{k|k-1} + \hat{w}_{k-1|k}^* \\ y_k &= h(\hat{x}_{k|k}) + \hat{v}_{k|k}^*\end{aligned}\quad (35)$$

If the measurement equation is linear, the resulting problem is a quadratic program (QP) which can be solved with small computational effort.⁸ We use the MatLab's *quadprog* function to solve the quadratic programming problem as given below.

$$\min_{\hat{\Theta}_{k|k}} \Psi_k = \hat{\Theta}_{k|k}^T S_{k|k}^{-1} \hat{\Theta}_{k|k} + d^T \hat{\Theta}_{k|k} \quad (36)$$

where:

$$\hat{\Theta}_{k|k} = \begin{bmatrix} w_{k-1|k} \\ v_{k|k} \end{bmatrix} \quad S = \begin{bmatrix} P_{k-1|k-1} & 0 \\ 0 & R_k \end{bmatrix} \quad d = 0 \quad (37)$$

subject to:

$$[H \quad I] \hat{\Theta}_{k|k} = y_k - h(\hat{x}_{k|k-1}) \quad (38)$$

In contrast to the unconstrained EKF formulations, state estimation with CEKF is formulated as an optimization problem so that constraints on state variables can be incorporated in this problem. Furthermore, it is not necessary to compute the Kalman gain (eq 10) and therefore the state covariance matrix P is computed using the discrete Riccati equation as in eq 24.

Although the CEKF is indeed MHE ($N=0$) and seems that CEFK then belongs to a family of MHE estimators, this formulation was firstly proposed and called CEKF by Gesthuisen et al.⁸. Note that CEKF is similar to EKF because the later also takes into account a zero-length horizon in the updating stage, i.e., the current state is estimated only using the current measurement on the horizon and it is equivalent to zero horizon length ($N=0$). In the absence of any constraints and for low process-noise uncertainties, these formulations are similar.

Afterwards, Vachhani & Rengaswamy¹⁸ have proposed essentially the same formulation as for CEKF with a different name: Recursive Nonlinear Dynamic Data Reconciliation (RNDDR). However, we have decided to adopt the earlier nomenclature.

Examples of numerical pitfalls by state covariance matrix computation

In this section, we outline the conditions that generate numerical pitfalls by state covariance matrix computation in two chemical engineering systems. The first one is a batch reactor with reversible reactions whose system model and measurement are such that multiple states satisfy the equilibrium condition and the second one is a CSTR with exothermic irreversible reactions and cooling jacket energy balance whose nonlinear behavior includes multiple steady-states and limit cycles.

System tending to multiple equilibrium points

The first example was introduced by Haseltine & Rawlings,⁷ and consists of a gas-phase batch reactor with multiple equilibrium points considering the following reversible reactions:



The model equations and the model parameters are given below.

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_1 c_A + k_2 c_B c_C \quad (40)$$

$$\frac{dc_B}{dt} = k_1 c_A - k_2 c_B c_C - 2(k_3 c_B^2 - k_4 c_C) \quad (41)$$

$$\frac{dc_C}{dt} = k_1 c_A - k_2 c_B c_C + 2k_3 c_B^2 - k_4 c_C \quad (42)$$

with

$$[k_1 \quad k_2 \quad k_3 \quad k_4] = [0.5 \quad 0.05 \quad 0.2 \quad 0.01] \quad (43)$$

Multiple states satisfy the equilibrium condition for a given measurement, which in this case is the system pressure at the equilibrium, evaluated by the following equation:

$$y = p = (c_A + c_B + c_C) RT \quad (44)$$

Table 1 shows the possible theoretical solutions, without measurement or state noise, at the equilibrium pressure given by the initial state:

$$x_0 = [0.5 \quad 0.05 \quad 0]^T \quad (45)$$

Table 1. Batch Reactor Equilibrium Points, No Measurement or Process Noise

Component	<i>EQ1</i>	<i>EQ2</i>	<i>EQ3</i>
c_A	0.0122	-0.0267	-1967.4
c_B	0.1826	-0.2372	-9.9454
c_C	0.6669	1.1257	1978.2

Note that only the solution *EQ1* has physically realizable states (nonnegative concentrations).

The state estimator parameters and the poor initial guess \bar{x}_0 used for this example were obtained from Haseltine & Rawlings:⁷

$$\Delta t = t_k - t_{k-1} = 0.25 \text{ min} \quad (46)$$

$$P_0 = 0.5^2 I_{3 \times 3} \quad (47)$$

$$Q = 0.001^2 I_{3 \times 3} \quad (48)$$

$$R = 0.25^2 \quad (49)$$

$$\bar{x}_0 = [0 \quad 0 \quad 4]^T \quad (50)$$

According to the authors, EKF fails in this example because the system model and measurement are such that multiple states satisfy the equilibrium condition and is given a

poor initial guess of the initial state for the estimator. Nonetheless, we cannot assert that EKF fails because two equilibrium points ($EQ1$ and $EQ2$ in Table 1) are possible due to the poor and incoherent guesses of the initial state and its covariance matrix used in this example, as discussed in the next section.

Results and analyses

Measurement Noise Perturbation

First, uniform and normally distributed random measurement noises were simulated. Either solution $EQ1$ or solution $EQ2$ (i.e., the inconsistent solution) is obtained in accordance with the set of random measurement noise employed into DEKF. Thus, we have chosen a set of random measurement noise which leads DEKF to converge to the solution $EQ1$ and added a noise measurement perturbation in order to lead it to converge to solution $EQ2$. As it can be seen in Figure 1, a noise measurement perturbation of 0.754 atm at $t=0.5 \text{ min}$ changes the estimated states trajectory from solution $EQ1$ to solution $EQ2$.

We have also experienced that other numerical pitfalls can lead DEKF to converge to solution $EQ2$, such as low-precision arithmetic, numeric system linearization by finite differences, poor guess of P_0 and incorrect values of the tuning parameters: Q and R .

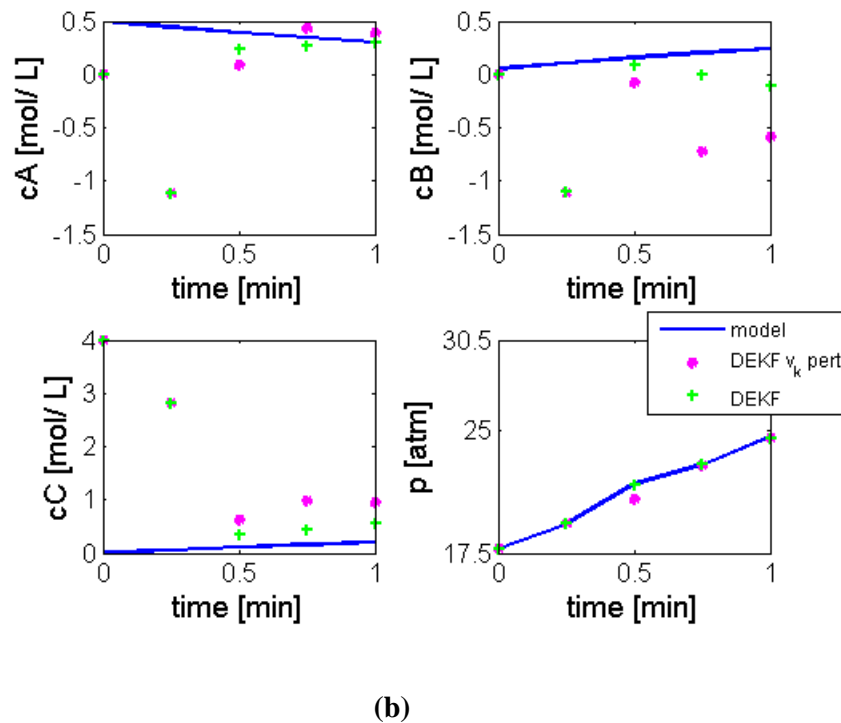
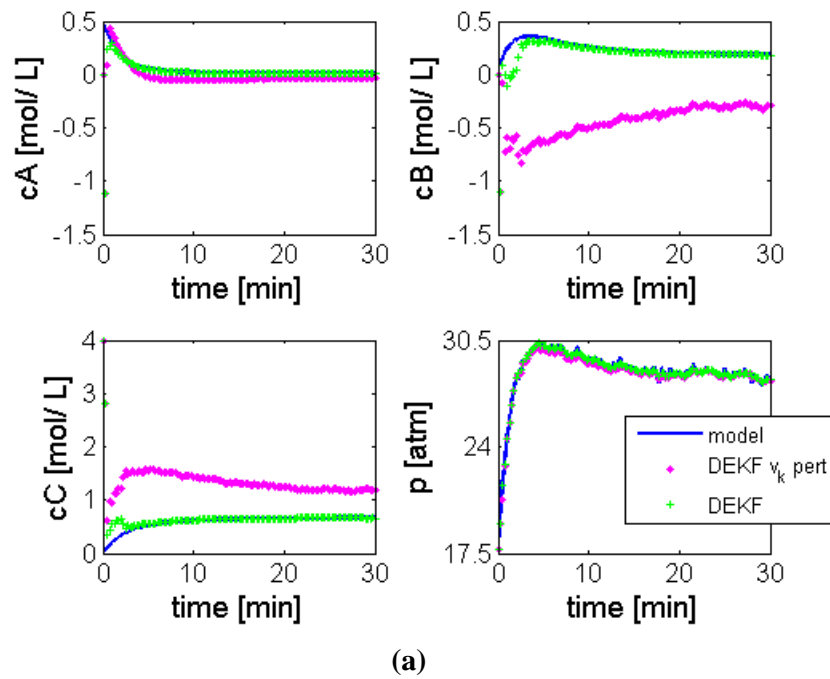


Figure 1. Comparison between the performances of DEKF with and without a noise measurement perturbation of 0.754 atm at $t=0.5 \text{ min}$: (a) until final batch time and (b) until $t=1 \text{ min}$.

Comparison between Unconstrained EKF formulations

RREKF and EKF-CRE were applied to the batch reactor in order to prevent the state estimator from converging to $EQ2$. In spite of a measurement noise perturbation, both unconstrained EKF formulations have converged to solution $EQ1$, as shown in Figure 2.

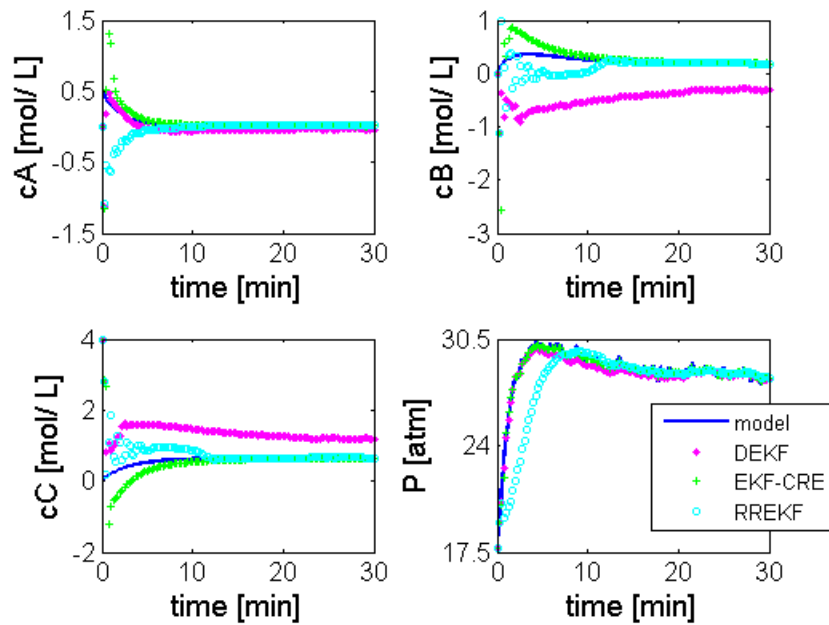


Figure 2. Comparison between DEKF, EKF-CRE and RREKF performances for a system tending to multiple equilibrium points.

RREKF disregards non-dominant eigenvectors which implies zero variance in the respective directions and no effect of measurement updates. For this example, we use rank-two approximation so the confidence region is an ellipse instead of a (hyper-)ellipsoid, reducing the dimensionality of the confidence region. After initial oscillations, the estimated states converge to the actual states. At the equilibrium point $x_{eq} = [0.0122 \quad 0.1843 \quad 0.6606]^T$, we observe that the eigenvector corresponding to the smallest eigenvalue or the non-

dominant eigenvector $v_{3,eq} = [0.9960 \quad -0.0876 \quad -0.0157]^T$ is orthogonal to the tangent of the equilibrium curve (the scalar product approaches zero). This eigenvector is not considered in the rank-two covariance approximation and thus the filter applies no correction in this direction orthogonal to the attractor.

EKF-CRE is not subjected to errors due to model discretization and the term $PH^T R^{-1}HP$ inserts nonlinearity into the state covariance matrix. Besides, the state covariance matrix computed by EKF-CRE in a single stage (eq 26) presents a smaller condition number, i.e., it is less sensitive to perturbations than the states covariance matrices computed by DEKF (eqs 14 and 17), as shown in Figure 3. The mentioned advantages of EKF-CRE over DEKF justify the convergence of this formulation to $EQ1$, even with a measurement noise perturbation.

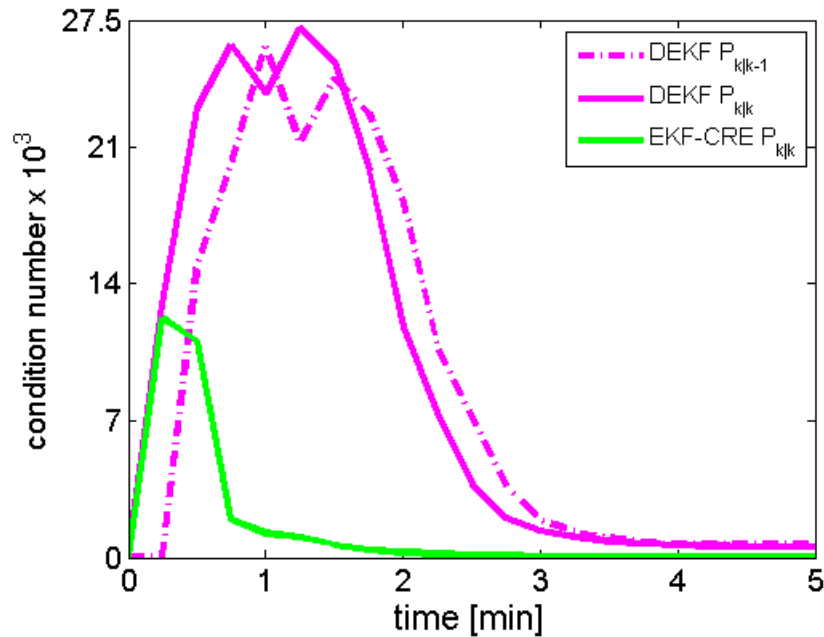


Figure 3. Comparison between the condition number of DEKF and EKF-CRE state covariance matrices for a system tending to multiple equilibrium points.

Although EKF-CRE and RREKF have prevented from physically unrealizable states at the final batch time, physically unrealizable states (negative concentrations) were unavoidable

during the batch. This fact is justified by the poor guesses of the initial state and its state covariance matrix.

Comparison between clipped DEKF and CEKF

To prevent physically unrealizable states, we have constrained DEKF with an ad hoc clipping strategy⁷ in which negative update values of the state are set to zero (i.e., if $\hat{x}_{k|k} < 0$, set $\hat{x}_{k|k} = 0$).

The comparison between clipped DEKF and CEKF performances are shown in Figure 4. Note that before eventually converging to the actual states, the pressure filtered by the clipped DEKF is quite larger than the measured one. However, the clipped DEKF in our work has presented a better performance in comparison to performance of the clipped DEKF in Haseltine & Rawlings.⁷ In their paper, the clipped DEKF drives the predicted pressure 3 orders of magnitude larger than the measured pressure before eventually converging to the actual states at a longer time scale (1 order larger than the converge time obtained in our work). It occurred because the authors have overestimated P_0 (cf. eq 47). While the initial guess for the concentration of specie C is too far from its actual value, the same is not valid to the concentration of specie B. Since the authors have chosen a P_0 with the same weight for all initial guesses (diagonal elements of P_0), this weight should be balanced between the initial guesses. We have selected, hence, a lower initial guess of the state covariance matrix

$$P_0 = 0.022^2 I_{3 \times 3} \quad (51)$$

Thus, due to a lower initial guess of the state covariance matrix, the clipped DEKF is shown as a reasonable alternative to prevent physically unrealizable states.

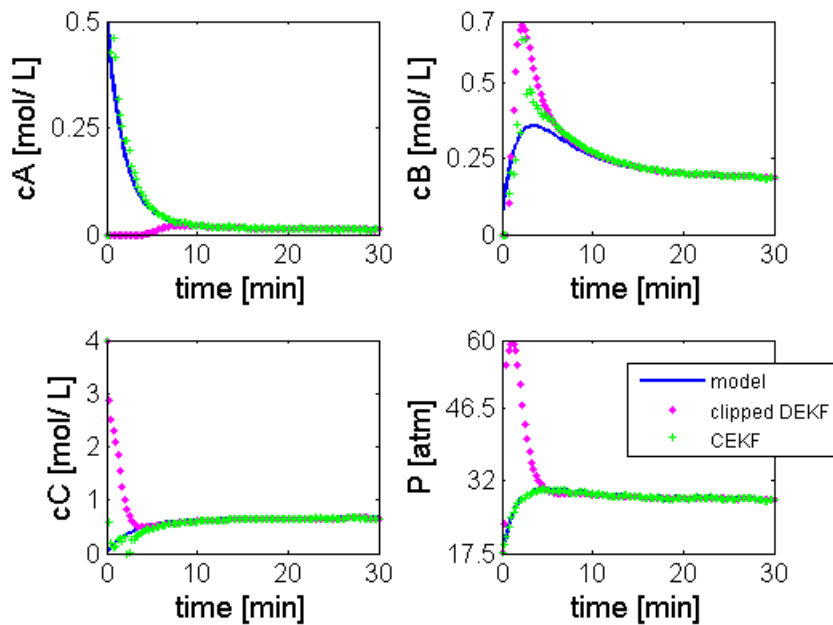


Figure 4. Comparison between clipped DEKF and CEKF performances for a system tending to multiple equilibrium points until $t=15 \text{ min}$.

A clipped DEKF, however, disregards the assumption that ν_k is a Gaussian random noise and does not let the Kalman gain to distribute properly the measurement residual throughout the estimated state and, thereby, corrects them. On the other hand, CEKF swiftly converges to the actual states and minimizes ω_k and ν_k in a least square sense, incorporating constraints into an optimization problem, which prevents from bad noises distribution. Figure 5 illustrates the distribution of ν_k for the clipped DEKF and the CEKF. It means that the main differences between the clipped DEKF and CEKF is that the CEKF preserves the gaussianity what is one of the main assumption of the Kalman Filter Approach.

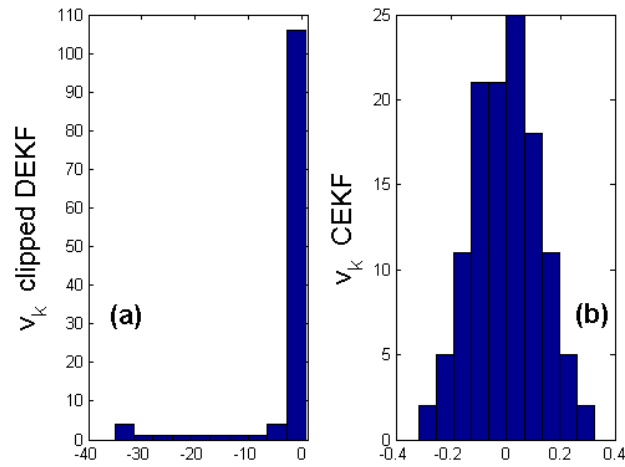


Figure 5. Comparison between the distribution of v_k for (a) clipped DEKF (non-Gaussian) and (b) CEKF (Gaussian).

It is well known that the quality of the MHE estimates is a function of the estimation horizon.⁷ Thus, we have enlarged the MHE estimation window to $N=2$ and compared its performance with the CEKF, as can be seen in Figure 6.

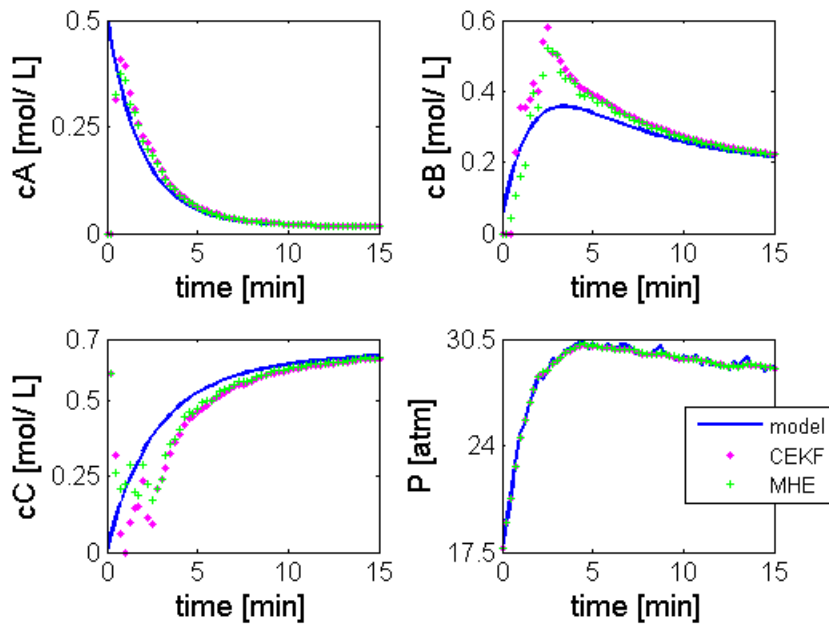


Figure 6. Comparison between CEKF and MHE ($N=2$) performances for a system tending to multiple equilibrium points until $t=15$ min.

MHE have presented a computational effort of 2 orders larger than CEKF and, hence, it is not justified for this process as the improvement of estimation results is marginal (cf. Figure 6). Therefore, due to the small computational effort of CEKF, possibility of incorporating constraints into an optimization problem, and the comparable estimation results to MHE, this approach seems to be the best choice for such case study.

System tending to multiple steady-states and limit cycles

As benchmark example, we have chosen a CSTR, as introduced by Torres & Tlacuahuac.¹⁹ The following two exothermic irreversible first-order reactions in series take place in the reactor:

Reactor volume and physical parameters are assumed to remain constant; perfect mixing is also assumed. In addition the dynamics of the cooling jacket is taken into account.



The dimensionless model equations are given below and the dimensionless parameters are defined in Table 2. More details on the model can be found in Torres & Tlacuahuac.¹⁹

$$\frac{dx_1}{d\tau} = q(x_{1f} - x_1) - x_1 \eta(x_3) \phi \quad (53)$$

$$\frac{dx_2}{d\tau} = q(x_{2f} - x_2) - x_2 \phi S \eta_2(x_3) + x_1 \phi S \eta(x_3) \quad (54)$$

$$\frac{dx_3}{d\tau} = q(x_{3f} - x_3) - \delta(x_4 - x_3) + \beta\phi[x_1\eta(x_3) + \alpha x_2\eta_2(x_3)S] \quad (55)$$

$$\frac{dx_4}{d\tau} = \delta_1(q_c(x_{4f} - x_4) + \delta\delta_2(x_3 - x_4)) \quad (56)$$

where x_1 is the dimensionless concentration of reactant A , x_2 is the dimensionless concentration of reactant B , x_3 is the dimensionless reactor temperature, and x_4 is the dimensionless cooling jacket temperature. The dimensionless cooling water volumetric flowrate, q_c , is the manipulated variable.

Table 2. Dimensionless Parameters of the CSTR¹⁹

$x_1 = C_A/C_{Afo}$	$x_3 = ((T - T_{fo})/T_{fo})\gamma$	$x_4 = T_c - T_{fo}/T_{fo}\gamma$	$x_2 = C_B/C_{Afo}$
$\gamma = E_1/RT_{fo}$	$\psi = E_2/E_1$	$\tau = (Q_o/V)t$	$q = Q/Q_o$
$q_c = Q_c/Q_o$	$\delta = UA/\rho C_p Q_o$	$\delta_1 = V/V_c$	$\delta_2 = \rho C_p/\rho_c C_{pc}$
$S = k_2(T_{fo})/k_1(T_{fo})$	$\phi = (V/Q_o)k_1(T_{fo})$	$\beta = -\Delta H_a C_{Afo}\gamma/\rho C_p T_{fo}$	$\alpha = -\Delta H_b/-\Delta H_a$
$x_{1f} = C_{Af}/C_{Afo}$	$x_{3f} = ((T_f - T_{fo})/T_{fo})\gamma$	$x_{4f} = ((T_{cf} - T_{fo})/T_{fo})\gamma$	$x_{2f} = C_{Bf}/C_{Afo}$
$\eta(x_3) = \exp\left[x_3/\left(1 + \frac{x_3}{\gamma}\right)\right]$	$\eta_2(x_3) = \exp\left[x_3\psi/\left(1 + \frac{x_3}{\gamma}\right)\right]$		

Torres & Tlacuahuac¹⁹ have analyzed input/output multiplicities of the full model using q_c as continuation parameter. In the bifurcation diagram of Figure 7, five steady-states and a bifurcation point were observed for x_3 when $q_c=2.3$.

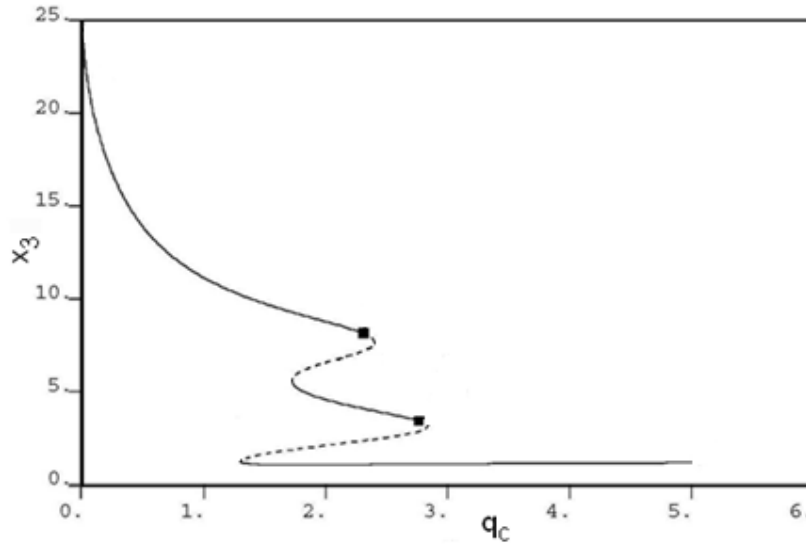


Figure 7. Bifurcation diagram of CSTR with two Hopf bifurcation points and five steady-states: (—) stable steady-state, (- - -) unstable steady-state, (■) Hopf bifurcation.

The CSTR model parameters values used for generating Figure 7 are shown in Table 3.

Table 3. CSTR Model Parameters Values¹⁹

β	Φ	δ	q	α	S	ψ	δ_1	δ_2	γ	x_{1f}	x_{2f}	x_{3f}	x_{4f}
8	0.133	1	1	1	0.01	1	10	1	1000	1	0	0	-1

We define the state and measurements to be

$$x = [x_1 \quad x_2 \quad x_3 \quad x_4]^T \quad (57)$$

$$y = [x_1 \quad x_2]^T \quad (58)$$

$$x_0 = [0.01 \quad 2 \quad 8 \quad 6]^T \quad (59)$$

We consider state estimators with the following parameters:

$$P_0 = 0.05^2 I_{4 \times 4} \quad (60)$$

$$\Delta t = t_k - t_{k-1} = 0.1 \quad (61)$$

$$R = \text{diag}(0.0001^2 \quad 0.001^2) \quad (62)$$

$$Q_0 = 0.001^2 I_{4 \times 4} \quad (63)$$

$$\bar{x}_0 = [0.11 \quad 0.3 \quad 6 \quad 4]^T \quad (64)$$

Results and analyses

In this section we analyze the state estimator performances considering the operating region in which five steady-states and a Hopf bifurcation point were observed for x_3 when $q_c=2.3$ (cf. Figure 7).

Comparison between Unconstrained EKF formulations

The poor initial guess \bar{x}_0 given by eq 64 was selected because it leads DEKF to converge to an undesirable steady-state. In the absence of any measurement noise perturbation, RREKF and EKF-CRE were also applied to the CSTR. As shown in Figure 8, both unconstrained formulations have converged to the actual steady-state, which in fact is a limit cycle.

Likewise for the first example, RREKF presents a slower convergence to the actual steady-state when compared to EKF-CRE.

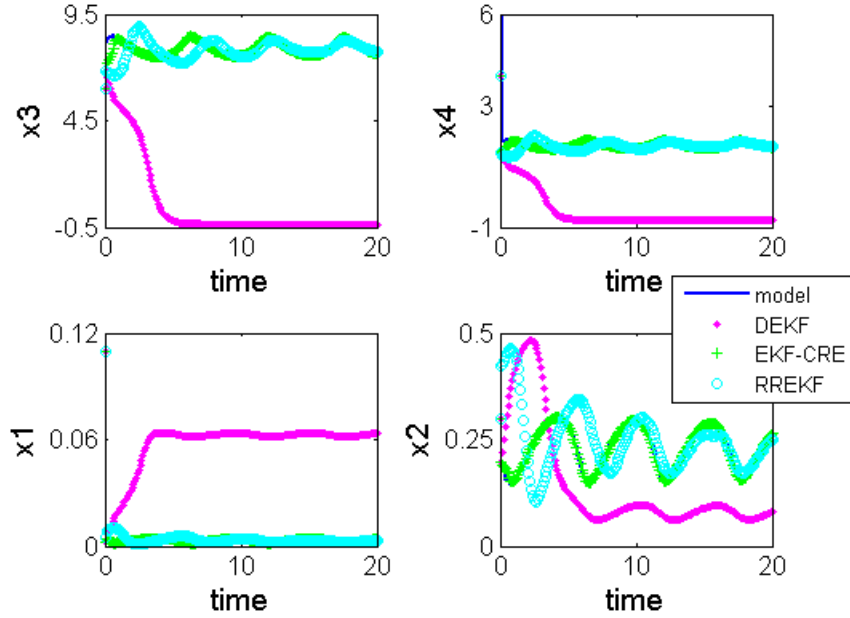


Figure 8. Comparison between DEKF, EKF-CRE and RREKF performances for a system tending to multiple steady-states.

As mentioned before, RREKF disregards non-dominant eigenvectors. For this example, we use rank-one approximation and three non-dominant eigenvectors were eliminated:

$$v_{2,eq} = [-1.0000 \quad 0.0007 \quad -0.0029 \quad -0.0009]^T$$

$$v_{3,eq} = [0.0020 + 0.0004i \quad -0.3298 - 0.2103i \quad -0.3506 - 0.0500i \quad 0.8495]^T$$

$$v_{4,eq} = [0.0020 - 0.0004i \quad -0.3298 + 0.2103i \quad -0.3506 + 0.0500i \quad 0.8495]^T$$

At the equilibrium point $x_{eq} = [0.0035 \quad 0.2516 \quad 7.7326 \quad 1.6472]^T$, we observe that the eigenvector $v_{2,eq}$ is orthogonal to the tangent of the equilibrium curve. The other two eigenvectors $v_{3,eq}$ and $v_{4,eq}$ have imaginary values. These three eigenvectors are not

considered in the rank-one covariance approximation and thus the filter applies no correction in their directions.

Therefore, the RREKF applies correction only in the dominant eigenvector direction: $v_{1,eq} = [0.0032 \ 0.2209 \ -0.9288 \ -0.2975]^T$. However, this estimator converges slowly to the actual steady-state for this example.

Again, the state covariance matrix computed by EKF-CRE in a single stage presents a smaller condition number than the state covariance matrices computed by DEKF, as shown in Figure 9.

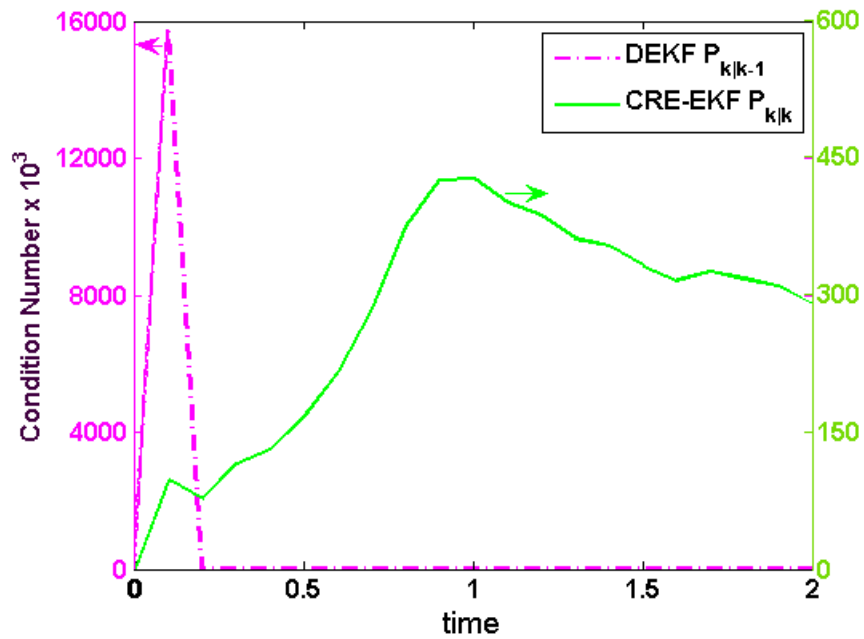


Figure 9. Comparison between the condition number of DEKF and EKF-CRE state covariance matrices for a system tending to multiple steady-states.

Comparison between clipped DEKF and CEKF

We have constrained DEKF with an ad hoc clipping strategy in order to prevent an undesirable steady-state. Nonetheless, the strategy of resetting to zero the negative update values has not performed well for this example and the clipped DEKF has converged to the same undesirable steady-state as for the DEKF (cf. Figure 8). Thus, we have selected stricter constraints for update values of the estimated states x_3 and x_4 :

$$\text{if } \hat{x}_3 < 5, \text{ set } \hat{x}_3 = 5$$

$$\text{if } \hat{x}_4 < 0, \text{ set } \hat{x}_4 = 1.5$$

The strategy of resetting to zero the negative update values was maintained for the measured states x_1 and x_2 .

The comparison between clipped DEKF and CEKF performances are shown in Figure 10.

Although both formulations have swiftly converged to the actual states, the CEKF have performed slightly better than the clipped DEKF for the CSTR case, as shown in Figure 10.

Finally, we have also enlarged the MHE estimation window to $N=2$ for the CSTR case. In addition, the state covariance matrix of MHE is computed recursively using either the discrete Riccati equation (MHE-DRE) (eq 31) or the continuous Riccati equation (MHE-CRE) (eq 26 applied to each horizon step). The comparison between the CEKF, MHE with DRE ($N=2$) and MHE ($N=2$) with CRE performances is shown in Figure 11.

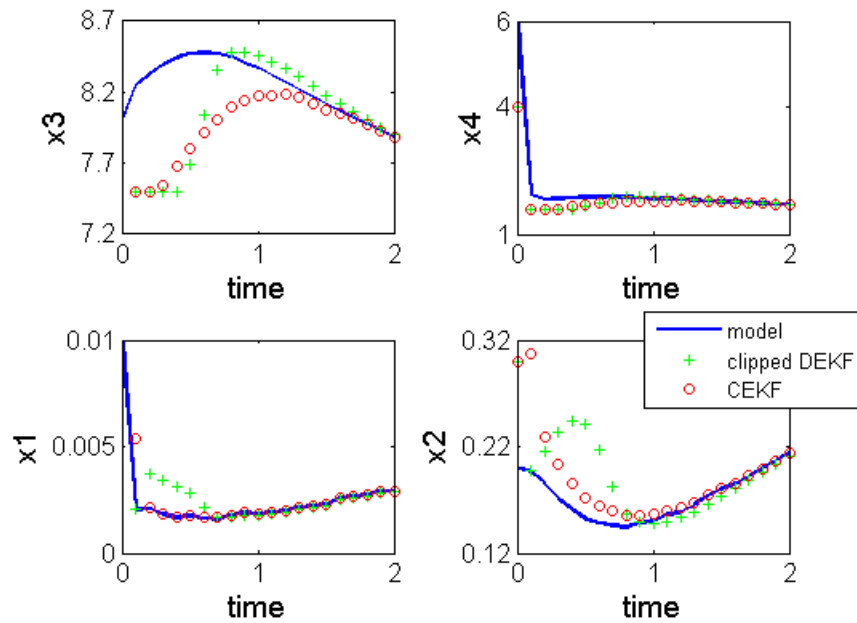


Figure 10. Comparison between clipped DEKF and CEKF performances for a system tending to multiple steady-states until $t=2$.

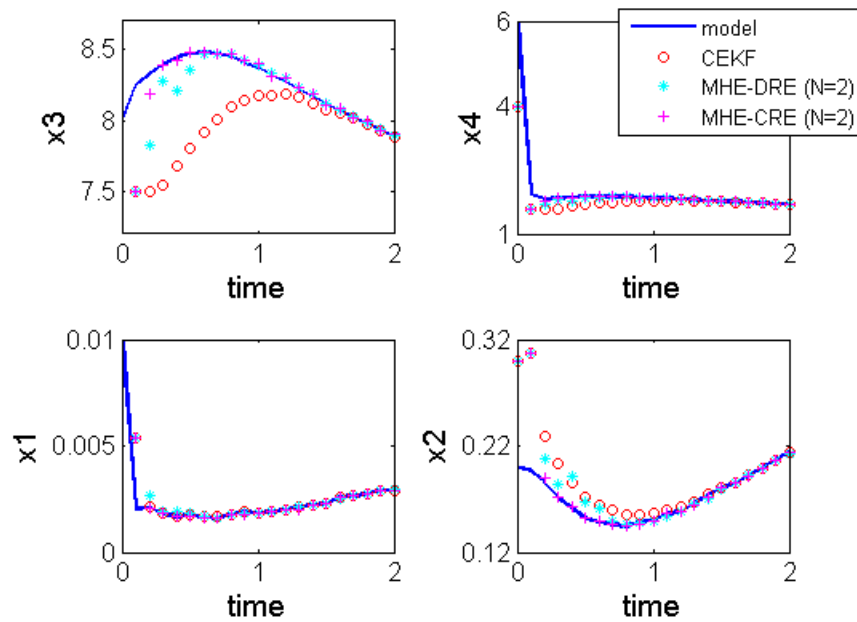


Figure 11. Comparison between CEKF, MHE using DRE ($N=2$) and MHE ($N=2$) with CRE performances for a system tending to multiple steady-states until $t=2$.

Accordingly to Figure 11, MHE is quite superior to CEKF to swiftly converge to actual states. Since CRE is not subjected to errors due to model discretization, it is not surprisingly that MHE-CRE presents more accurate estimates of states.

MHE provides improved state estimation and presents greater robustness to poor guess of the initial state. However, afterwards converge towards the actual states, both MHE and CEKF perform equally accurately and, therefore, the use of MHE becomes needless.

Conclusions

This paper outlines the numerical robustness of the state covariance matrices used in three unconstrained Extended Kalman Filter (EKF) formulations and one constrained EKF formulation (CEKF), for two chemical engineering examples tending to multiple solutions.

The first example is a batch reactor with reversible reactions whose system model and measurement are such that multiple states satisfy the equilibrium condition. With a measurement noise perturbation, we outline a condition that has led a classical EKF formulation (DEKF) to converge to physically unrealizable or undesired states. According to our results, EKF-CRE and RREKF are more numerically robust in computing the state covariance matrix than DEKF. As both formulations have avoided an increase in error propagation due to a measurement noise perturbation, they were able to converge to the actual steady-state. Thus, a suited choice of the EKF formulation based on the state covariance matrix equation is essential to prevent from physically unrealizable states. However, due to the poor guesses of the initial state and its state covariance matrix for the batch reactor, EKF-CRE and RREKF have not prevented from physically unrealizable states during the batch. Although the clipped DEKF converges slowly to the actual states and disregards the assumption that the measurement noise is a Gaussian random noise, it has

shown as a reasonable alternative to prevent physically unrealizable states. On the other hand, the CEKF can be seen as the best technique to systems with such behavior due to the possibility of incorporating constraints into an optimization problem minimizing the noise in a least square sense, preventing from bad noise distribution. Besides, it is simpler, computationally less demanding than the MHE, and has comparable performance.

The second example is a CSTR with exothermic irreversible reactions and cooling jacket, whose nonlinear behavior includes multiple steady-states and limit cycles. The results for the CSTR demonstrate that, similarly to the batch reactor case, EKF-CRE and RREKF have converged to the actual steady-state. However, the clipped DEKF and CEKF have presented faster convergence to the actual states, and the CEKF have performed slightly better than the clipped DEKF for this example. Contrarily to the batch reactor, MHE presented a superior performance for the CSTR case. Further, we have demonstrated that MHE performs better when the state covariance matrix is computed recursively using the continuous-time Riccati equation.

Since MHE employs a trajectory of measurements as opposed to measurements at only a single time, it is better suited than the CEKF (MHE with a zero horizon length) to handle with poor guess of the initial state and process disturbances. In these circumstances, it can be possible for the CEKF to fail to swiftly converge to the actual states. Hence, an adaptive strategy to select the MHE horizon length shall be considered for future work. For this purpose, the state estimation quality is evaluated through sensitivity analyses to trigger the horizon length augment when necessary. This approach aims to handle effectively the numerical pitfalls while requiring only a minimum size of horizon length reducing the online computational expense.

Acknowledgment

We gratefully acknowledge Prof. James Rawlings and Dr. Fernando Lima for the fruitful discussions. The first author also would like to thank the financial support from the German Academic Exchange Service (DAAD) and from PETROBRAS S.A.

Literature Cited

(1) Valappil, J.; Georgakis, C. (1999). A Systematic Tuning Approach for the Use of Extended Kalman Filters in Batch Processes. *Proc. of the American Control Conf., IEEE Press*, Piscataway, NJ, 1143.

(2) Valappil, J.; Georgakis, C. (2000). Systematic Estimation of State Noise Statistics for Extended Kalman Filters. *AIChE J.*, 46(2), 292-398.

(3) Brown, R.G.; Hwang, P.Y.C (1996). Introduction to Random Signals and Applied Kalman Filtering: With MATLAB Exercises and Solutions. John Wiley & Sons, U.S.A.

(4) Grewal, M. S., and Andrews, A. P. (2001). Kalman Filtering: Theory and Practice Using MatLab, Wiley & Sons.

(5) Simon, D. (2006). Optimal State Estimation: Kalman, H-infinity, and Nonlinear Approaches. John Wiley & Sons, U.S.A.

(6) Rao, C. V., Rawlings, J. B. (2002). Constrained Process Monitoring - Moving Horizon Approach. *AIChE*, 48(1), 97-109.

(7) Haseltine, E.L.; Rawlings, J.B. (2005). Critical Evaluation of Extended Kalman Filtering and Moving-Horizon Estimation. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44, 2451-2460.

(8) Gesthuisen, R.; Klatt, K. -U.; Engell, S. (2001). Optimization-based State Estimation: a Comparative study for the Batch Polycondensation. In Proceedings of ECC-2001.

(9) Nicholas, J. H. (2005). The Scaling and Squaring Method for the Matrix Exponential Revisited. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 26(4), 1179-1193.

(10) Verlaan, M. and A. Heemink (1997). Tidal flow forecasting using reduced rank square root filters. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment (SERRA)* 11(5), 349–368.

(11) Pham, D. T.; J. Verron, and M. C. Roubaud (1998). A singular evolutive extended Kalman filter for data assimilation in oceanography. *Journal of Marine Systems* 16(3-4), 323–340.

(12) Muske, K.R.; Rawlings, J.B. (1994). Nonlinear Moving Horizon State Estimation. *NATO ASI Series, Kluwer Academic*, 293, 349–365.

(13) Robertson, D. G., Lee, J. H., and Rawlings, J. B. (1996). A moving horizon-based approach for least-squares estimation. *AIChE Journal*, 42(8), 2209-2224.

(14) Rao, C.V.; Rawling, J.B.; Mayne, D.Q. (2003). Constrained State Estimation for Nonlinear Discrete-Time Systems: Stability and Moving Horizon Approximations. *IEEE Trans. Autom. Control*, 48(2), 246-258.

(15) Cox, H. (1964). On the Estimation of State Variables and Parameters for Noisy Dynamic Systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 9(1), 5-12.

(16) Petzold, L.R. (1983) DASSL: differential algebraic system solver. In: Technical Report, Sandia National Laboratories, Livermore, USA.

(17) Secchi, A.R.; Morari, M.; Biscaia, E.C., Jr. (1991). DAWRS: A Differential - Algebraic System Solver by the Waveform Relaxation Method. *The Sixth Distributed Memory Computing Conference (DMCC6)*. Portland, Oregon, 502-505.

(18) Vachhani, P., R. Rengaswamy, V. Gangwal, and S. Narasimhan (2005). Recursive estimation in constrained nonlinear dynamical systems. *AIChE Journal* 51(3), 946–959.

(19) Torres, A.E.G. and Tlacuahuac, A.F. (2000). Effect of process modeling on the nonlinear behaviour of a CSTR Reactions $A \rightarrow B \rightarrow C$. Chemical Engineering Journal, 77(2000), 153-164.

Capítulo 6

A new process-noise covariance matrix tuning algorithm for Kalman-based state estimators

Artigo submetido para publicação no periódico *AIChE Journal*.

Resumo: Um novo algoritmo para a sintonia da matriz de covariância do ruído de processo é apresentado neste artigo. Este algoritmo tem por objetivo a atualização on-line do modelo do processo e consiste de duas etapas de estimação de estados interligadas por uma etapa de estimação de parâmetros. Adicionalmente, incorpora a aproximação de linearização proposta por Valappil & Georgakis (1999; 2000) com dois métodos para a determinação da matriz de covariância dos parâmetros. No método direto, a matriz de covariância dos parâmetros é calculada durante a etapa de estimação de parâmetros com o algoritmo SELEST (Secchi et al., 2006) (Apêndice), enquanto no método da sensibilidade, a matriz de covariância dos parâmetros é obtida através de uma matriz de sensibilidade variante no tempo. O algoritmo proposto foi implementado em dois estudos de caso distintos: um reator semi-batelada (Forbes, 1994) e um reator CSTR com multiplicidade de soluções (Torres & Tlacuahuac, 2000). Os resultados obtidos demonstraram que os métodos propostos melhoram significativamente o desempenho de um filtro de Kalman estendido quando comparados com: a) o caso de uma matriz de covariância de processo constante e diagonal na presença de incertezas paramétricas constantes, b) o caso em que o modelo implementado no filtro de Kalman estendido é estruturalmente diferente do modelo da planta (simulada) e c) os métodos da literatura revisados neste artigo.

A New Process-Noise Covariance Matrix Tuning Algorithm for Kalman-Based State Estimators

Nina P. G. Salau^{1,3}, Argimiro R. Secchi², Jorge O. Trierweiler¹ and Wolfgang Marquardt³*

1- GIMSCOP - Chemical Engineering Department, Federal University of Rio Grande do Sul, R. Eng. Luiz Englert, s/n°, CEP: 90040-040, Porto Alegre, Brazil

2- PEQ – COPPE - Federal University of Rio de Janeiro, CP: 68502, CEP: 21945-970,
Rio de Janeiro, Brazil

3- AVT - Process Systems Engineering, RWTH Aachen University, Turmstr. 46, 52064,
Aachen, Germany

* Correspondence concerning this article should be addressed to N. P. G. Salau at ninas@enq.ufrgs.br.

Abstract: A suitable design of state estimators requires a representative model for capturing the plant behavior and knowledge about the noise statistics, which are generally not known in practical applications. While the measurement noise covariance can be directly derived from the measurement device, the determination of the process-noise covariance is much less straightforward. Furthermore, continuous processes with grade transitions and batch or semibatch processes are often characterized by time-varying structural uncertainties which are, in many cases, partially and indirectly reflected in the uncertainty of the model parameters. It has been shown that the robust performance of state estimators significantly enhances with a time-varying and non-diagonal process-noise covariance matrix, which explicitly takes parameter uncertainties into account. This paper presents methods for the computation of the parameter covariance matrix. In the direct method, the parameter covariance matrix is calculated during the parameter estimation step of the SELEST algorithm, while in the sensitivity method, the parameter covariance matrix is obtained through a time-varying sensitivity matrix. The results of two case studies, a semibatch and a continuous stirred tank reactor, have shown the efficacy of these methods in improving the performance of an extended Kalman filter (EKF). Furthermore, performance is considerably improved compared to tuning based on Monte Carlo, random variation and linear sensitivities reported in the literature.

Keywords: state estimator design, noise statistics, parameter estimation, sensitivity analyses.

Introduction

Since usually not all states of a nonlinear dynamic model are measured, they need to be estimated to be used in control and optimization strategy. State estimators are used to

estimate the unmeasured states and to filter the measured ones. Therefore, they are essential for any advanced control and optimization application. Besides an accurate plant model, an appropriate choice of the process and measurement noise covariance is crucial in applying state estimators. The measurement error covariance matrix is usually known from the error statistics of the measurement device and is readily available. However, in actual problems, the process-noise statistics are often unknown, do not satisfy the assumptions of normal distribution and are mostly due to parametric or even structural uncertainties in the model.

Adaptive filtering techniques have been used for linear¹ and nonlinear systems, and these techniques estimate the noise statistics along with the state estimates.² The methods in this field can be divided into four general categories:² Bayesian, maximum likelihood, covariance matching, and correlation techniques. Bayesian and maximum likelihood methods have fallen out of favor because of their sometimes excessive computation times. Covariance matching refers to the computation of the covariance from the residuals of the state estimation problem. It has been shown to give biased covariance estimates. Correlation techniques are the most popular for estimating state covariance¹. However, most of the methods just mentioned assume constant noise characteristics and the availability of data required to obtain a true representation of the noise statistics. For continuous or batch processes showing time-varying process dynamics and operating in a wide range of process conditions, these noise statistics are also time-varying. The use of a fixed value of noise statistics can lead to poor filter performance and even result in filter divergence.^{3,4,5}

Fotopoulos et al.⁶ have demonstrated that improved filter performance is realized using a time-varying and non-diagonal process-noise covariance matrix compared to a constant and diagonal one. Using so called tendency models in off-line Monte Carlo simulations, their methodology considers the nonlinear dependence of the system on the fitted parameters to estimate the process-noise covariance matrix.

A generalization of the methodology proposed by Fotopoulos et al.⁶ is introduced by Valappil & Georgakis.^{3,4} Since batch processes often show a great deal of variation from batch to batch, the authors claim that Monte Carlo simulations are more appropriate to estimate a time-varying process-noise covariance matrix. Valappil & Georgakis^{3,4} have also introduced a linearization approach for the calculation of a time-varying and non-diagonal process-noise covariance matrix. It is based on a Taylor series expansion of the nonlinear equations around the nominal parameter values. The main advantage of the linearization approach is that it involves very simple algebraic calculations and can easily be executed on-line. Furthermore, for systems that are only mildly nonlinear, the linearization approach is quite sufficient and the introduction of Monte Carlo simulations does not improve the EKF performance significantly. Afterwards this approach was employed successfully in EKF-based NMPC algorithms for batch processes.^{7,8,9}

Leu & Baratti⁵ have proposed a procedure to estimate the process model and measurements covariance matrices of an EKF considering a perfect model structure and Gaussian distribution of errors. This procedure is quite similar to the linearization approach introduced by Valappil & Georgakis^{3,4}. However, in the method proposed by Leu & Baratti,⁵ the tuning of the covariance matrices amounts to the physically meaningful determination of the errors through the constant covariance matrices, determined by the few experiments necessary to characterize the plant model, and through the Jacobian of the plant model with respect to the parameters.

In this work, a new process-noise covariance matrix tuning algorithm is proposed. It is an extension of the linearization approach proposed by Valappil & Georgakis.^{3,4} Two methods for the computation of the parameter covariance matrix are presented. In the direct method, the parameter covariance matrix is found during the parameter estimation step using SELEST¹⁰, an algorithm for automatic selection of model parameters based on an extension

of the identifiability measure of Li et al.¹¹ In the sensitivity method, the parameter covariance matrix is obtained from a time-varying sensitivity matrix computed via the solution of the system of sensitivity equations. Both methods can be successfully applied for state estimator design.

Problem formulation and solution strategies

Before addressing the algorithm for the tuning of the process-noise covariance matrix, a brief review regarding the hybrid extended Kalman filter (H-EKF) and the approaches found in the literature to calculate the process-noise statistics are discussed. Finally, the algorithm for the tuning of the process-noise covariance matrix and the two proposed methods to calculate the parameter covariance matrix are presented.

Hybrid Extended Kalman Filter (H-EKF)

Consider the following nonlinear dynamic system to be used in the state estimator

$$\begin{aligned}
 \dot{x} &= f(x, u, t, p) + \omega(t) \\
 x(0) &= x_0 \\
 y_k &= h_k(x_k, t_k) + v_k \\
 \omega(t) &\sim (0, Q) \\
 v_k &\sim (0, R_k)
 \end{aligned} \tag{1}$$

where u denotes the deterministic inputs, x denotes the states, y denotes the measurements, and p denotes the parameters. The process-noise vector, $\omega(t)$, and the measurement-noise vector, v_k , are assumed to be a white Gaussian random process with zero mean and

covariance Q and R_k , respectively. The H-EKF formulation uses a continuous and nonlinear model for state estimation, linearized models of the nonlinear system for state covariance estimation, and discrete measurements.¹² This is often also referred to as continuous-discrete extended Kalman filter.¹³ The system is linearized at each time step to obtain the local time-varying system matrices

$$F_x(t) = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x,u,t,p_{nom}} \quad (2)$$

$$H(t) = \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)_{x,u,t,p_{nom}}$$

where the subscript *nom* describes nominal values. The equations that compose the different steps in the H-EKF are given below:

State Transition Equation:

$$\hat{x}_{k|k-1} = \hat{x}_{k-1|k-1} + \int_{k-1}^k f(\hat{x}, u, \tau, p) d\tau \quad (3)$$

State Covariance Transition Equation:

$$P_{k|k-1} = P_{k-1|k-1} + \int_{k-1}^k \left[F_x(\tau) P(\tau) + P(\tau) F_x(\tau)^T + Q \right] d\tau \quad (4)$$

Kalman Gain Equation:

$$K_k = P_{k|k-1} H_k^T \left[H_k P_{k|k-1} H_k^T + R_k \right]^{-1} \quad (5)$$

State Update Equation:

$$\hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + K_k \left[y_k - h(\hat{x}_{k|k-1}, t_k) \right] \quad (6)$$

State Covariance Update Equation:

$$P_{k|k} = [I_n - K_k H_k] P_{k|k-1} [I_n - K_k H_k]^T + K_k R_k K_k^T \quad (7)$$

Usually the error covariances matrices Q and R_k are considered as tuning parameters to adjust the filter performance. As mentioned earlier, the measurement-noise statistics are obtained from repetitive measurements and are therefore readily available. Thus, the focus of this work will lie on the determination of the process-noise statistics.

Systematic approaches to calculate the $\omega(t)$ statistics

As introduced by Valappil & Georgakis,^{3,4} the approaches to calculate the $\omega(t)$ statistics of Eq. 1 assumes that $\omega(t)$ mostly represents the effects of parametric uncertainty. The estimated parameters in the model are assumed to be normally distributed with the mean and covariance given by

$$E[p] = p_{nom} \quad (8)$$

$$E\left[(p - p_{nom})(p - p_{nom})^T\right] = C_p \quad (9)$$

where p_{nom} denotes the nominal parameter values and C_p the parameter covariance matrix. As $\dot{x}(t)$ and $\dot{x}_{nom}(t)$ are desired to be the same, $\omega(t)$ has to obey the constraint

$$\omega(t) = f(x, u, t, p) - f(x_{nom}, u, t, p_{nom}) \quad (10)$$

The two strategies proposed by Valappil & Georgakis^{3,4} differ in the way the $\omega(t)$ statistics are calculated.

Monte Carlo approach

This approach is a generalization of the methodology proposed by Fotopoulos et al.⁶ which accounts for the nonlinear dependence of the system on the fitted parameters by Monte Carlo simulations. For the k^{th} Monte Carlo simulation, using parameters p^k , the nonlinear model with p_{nom} is used to calculate the process noise as

$$\omega^k(t) = f(\hat{x}, u, t, p^k) - f(\hat{x}, u, t, p_{nom}) \quad (11)$$

Monte Carlo simulations are used here to capture the effect of parameter uncertainties on the process-noise statistics. The plant parameters are assumed to be normally distributed with the mean value equal to the nominal parameter and the standard deviation obtained from the parameter covariance matrix:

$$p_i \sim N(p_{nom}, C_p) \quad (12)$$

For nonlinear systems, the process noise has a non-zero mean $\bar{\omega}(t)$. The deviation from this mean is defined as

$$\tilde{\omega}^k(t) = \omega^k(t) - \bar{\omega}(t) \quad (13)$$

A time-varying and non-diagonal matrix Q is obtained as the covariance of the deviations $\tilde{\omega}^k(t)$.

Linearization approach

Performing a first-order Taylor's series expansion of the right-hand side of Eq. 10 at a nominal state trajectory (x_{nom}) corresponding to nominal parameters (p_{nom}) and neglecting higher-order terms results in the approximation

$$\omega(t) = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x_{nom}, u, t, p_{nom}} [x(t) - x_{nom}(t)] + \left(\frac{\partial f}{\partial p} \right)_{x_{nom}, u, t, p_{nom}} [p - p_{nom}] \quad (14)$$

Assuming that $[x(t) - x_{nom}(t)] = [\hat{x}(t) - x_{nom}(t)] \approx 0$, the process noise can be calculated from

$$\omega(t) = F_{p_{nom}}(t)[p - p_{nom}] \quad (15)$$

where $F_{p_{nom}}(t)$ is the Jacobian computed at the parameters and estimated states

$(\partial f / \partial p_{nom})_{\hat{x}, u, t, p_{nom}}$. Calculating the expected value of both sides of Eq. 15 yields

$$\bar{\omega}(t) = F_{p_{nom}}(t) \Delta \bar{p} = 0 \quad (16)$$

indicating that the noise sequence $\omega(t)$ has zero mean if the employed linearization in the parameters was accurate. Then, the desired computation of the covariance $Q(t)$ of $\omega(t)$ is given by

$$Q(t) = F_{p_{nom}}(t) C_p F_{p_{nom}}^T(t) \quad (17)$$

where $C_p \in \mathfrak{R}^{np \times np}$ is the parameter covariance matrix.

Algorithm for tuning the Q-matrix

This section presents the algorithm for the tuning of the process-noise covariance matrix. Since any model is an abstraction of reality, both structural and parametric uncertainties are present to some degree in most real situations. The structural uncertainties are captured pragmatically in many cases as uncertainty in model parameters. Parameter estimation is a key ingredient to reduce uncertainty in the parameters. Contrary to many contributions on parameter estimation, in chemical engineering we do not consider all model states to be measured and state estimation is therefore necessary.

To effectively capture the effects of parametric uncertainty on state estimates determined with an EKF, the matrix Q has to be tuned properly. Our algorithm consists of two state estimation steps and a parameter estimation step in between.

State estimation – first step

Given a set of plant data, a previous state estimation step with nominal parameters is performed to provide information on unmeasured states and to filter the measured ones. The estimated and filtered states are then used in the subsequent parameter estimation step.

Parameter estimation step

The proposed algorithm requires knowledge on the parameters to be considered time-varying. In this step, the SELEST algorithm estimates the best possible subset of parameters from the set of all model parameters which are assumed to be time-varying. The SELEST algorithm also provides parameter estimates to be used in a posterior state estimation step with the proposed methods for C_p computation.

State estimation – second step

The state estimation is carried out a posteriori with the estimated parameters and a time-varying and non-diagonal matrix Q obtained by a procedure using matrix C_p . In this case, C_p is computed by one of the proposed methods, the direct or the sensitivity method.

Since the unmeasured states are unknown in practical applications, the state estimation accuracy shall be quantified. The algorithm for tuning the Q -matrix is hence executed iteratively with the proposed methods for the computation of the matrix C_p until the state estimation accuracy has been improved up to the tolerance ε .

Note that the matrix Q in the proposed algorithm relies on p_{est} in Eq. 17 rather than p_{nom} , as suggested by Valappil and Georgakis^{3,4}.

Direct method: parameter covariance matrix C_p via parameter estimation

In this method, C_p is constant and directly obtained from the parameter estimation procedure. For this purpose, we have selected the SELEST algorithm proposed by Secchi et al.¹⁰. This algorithm uses a sensitivity matrix based procedure to quantify the effects of the parameters on the measured outputs and a linear-independence metric as proposed by Li et al.¹¹ extended to multiple operating points and dynamic data. A predictability degradation index and a parameter correlation degradation index are used as stopping criteria. The definitions of these indices as well as the SELEST algorithm are given in Appendix A.

Sensitivity method: parameter covariance matrix C_p via sensitivity integration

Consider the general process model.

$$\dot{x} = f(x, u, t, p_{nom}) \quad (18)$$

Differentiation of Eq. 18 with respect to the parameters p_{nom} gives:

$$\dot{S} = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) S + \left(\frac{\partial f}{\partial p_{nom}} \right) = F_x(t)S + F_{p_{nom}}(t) \quad (19)$$

where S is the sensitivity matrix $(\partial x / \partial p_{nom})$ determined by numerical integration of Eq. 19 along with the model of Eq. 18 using some tailored integration method.^{14,15,16}

As pointed out by Sharma & Arora¹⁷, the sensitivity matrix can play a role in quantifying how good the estimate of the parameters is. For uncorrelated and normally distributed measurement errors and for nonlinear least squares problems, C_p can be calculated from

$$C_p \approx s^2 (S^T S)^{-1} \quad (20)$$

where s^2 accounts for the accuracy of the experimental data \hat{Y} used to fit the parameters. It is usually estimated from the mean square of the residual.

$$s^2 = \frac{\sum (\hat{Y} - Y_p)^T (\hat{Y} - Y_p)}{n - np} \quad (21)$$

where Y_p refers to the predicted measurements, n is the number of samples and np is the number of estimated parameters.

The residual mean square s^2 is also obtained from parameter estimation using SELEST algorithm. Since S is time-varying, C_p is also time-varying, which represents an advantage of the sensitivity method.

Case studies

Two examples are presented in the following to illustrate the performance of the EKF with the different approaches for the tuning of the process-noise covariance matrix.

Monte Carlo Approach: As discussed earlier, this approach has been proposed by Valappil and Georgakis^{3,4} as a generalization of the methodology proposed by Fotopoulos et al.⁶ For

the first case study presented later, 100 Monte Carlo simulations with different parameter values were used, resulting in 100 evaluations of the process noise.

Linearization Approach:^{3,4} This approach will be evaluated from different techniques to compute the matrix C_p :

1. *Random Variation:*^{3,4} The parameters in the plant, p , are assumed to vary with time, taking different values at each sample interval taken from a normal distribution, i.e.,

$$p_i \sim N(\bar{p}_i, \sigma_i) \quad (22)$$

The mean value of the varying plant parameter, \bar{p} , is assumed to be different from the nominal value p_{nom} of the model parameter by a standard deviation σ . The parameter covariance matrix used for the process-noise covariance calculation is assumed to be diagonal, with the diagonal values given by

$$C_p = \sigma^2 \quad (23)$$

2. *Linear Sensitivity:*⁵ The matrix C_p can be determined from few experiments necessary to characterize the plant model and the Jacobian of the plant model with respect to the parameters:

$$C_p \approx \sigma^2 \left(\sum_{\mu=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial p_{nom}} \right)_{\mu} \left(\frac{\partial f}{\partial p_{nom}} \right)_{\mu}^T \right)^{-1} \quad (24)$$

σ is the standard deviation and μ enumerates the N experiments. As we do not consider experimental case studies, an adaptation of this method to simulated case studies is necessary.

Thus, the sensitivity matrix, S , in Eq. 17 is replaced by its linear form

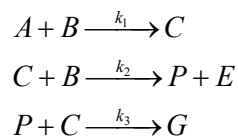
$$S = \left(\frac{\partial f}{\partial p_{nom}} \right) \quad (25)$$

and the parameter covariance matrix is computed as in Eq. 20. It has to be emphasized that S is now derived from linear estimation theory and can result in an underestimate for highly nonlinear systems.⁴

3. *Direct method*: Introduced in this paper.
4. *Sensitivity method*: Introduced in this paper.

Case study 1: Williams-Otto semibatch reactor

A description of the Williams-Otto semibatch reactor, as introduced by Forbes,¹⁸ is provided in this section. The following reactions take place in the reactor:



Reactant A is already present in the reactor, whereas reactant B is fed continuously into the reactor. During the exothermic reactions the products P and E as well the side-product G are

formed. The heat generated by the exothermic reaction is removed by a cooling jacket, which is controlled by manipulating the cooling water temperature. The manipulated control variables of this process are the inlet flow rate F_B of reactant B and the cooling water temperature T_w , whose values have been kept constant in our study. The model equations are given below and the model parameters are reported in Table 1:

$$\frac{dm_A}{dt} = -r_1V \quad (26)$$

$$\frac{dm_B}{dt} = F_B - \frac{M_B}{M_A} r_1V + r_2V \quad (27)$$

$$\frac{dm_C}{dt} = \frac{M_C}{M_A} r_1V - \frac{M_C}{M_B} r_2V - r_3V \quad (28)$$

$$\frac{dm_P}{dt} = \frac{M_P}{M_B} r_2V - \frac{M_P}{M_C} r_3V \quad (29)$$

$$\frac{dm_E}{dt} = \frac{M_E}{M_B} r_2V \quad (30)$$

$$\frac{dm_G}{dt} = \frac{M_G}{M_C} r_3V \quad (31)$$

$$\frac{dV}{dt} = \frac{F_B}{\rho} \quad (32)$$

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{H - F_B c_p T_r}{V \rho c_p} \quad (33)$$

where:

$$V = \frac{m_A + m_B + m_C + m_P + m_E + m_G}{\rho} \quad (34)$$

$$r_1 = k_1 \frac{m_A m_B}{V^2}; \quad r_2 = k_2 \frac{m_B m_C}{V^2}; \quad r_3 = k_3 \frac{m_C m_P}{V^2} \quad (35)$$

$$k_i = A_i e^{\frac{-E_i}{T_r + T_{ref}}}; \quad i = 1, 2, 3 \quad (36)$$

$$H = F_B c_p T_{in} - \Delta H_1 r_1 V - \Delta H_2 r_2 V - \Delta H_3 r_3 V - V \frac{A_0}{V_0} U (T_r - T_w) \quad (37)$$

Table 1. Model Parameters of Williams-Otto Semibatch Reactor

M _A	100 kg.kmol ⁻¹	A ₂	7.212x10 ⁵ m ³ kg ⁻¹ s ⁻¹	ΔH ₁	-263.8 kJ.kg ⁻¹	m _A (t ₀)	2000 kg
M _B	200 kg.kmol ⁻¹	A ₃	2.674x10 ⁹ m ³ kg ⁻¹ s ⁻¹	ΔH ₂	-158.3 kJ.kg ⁻¹	m _B (t ₀)	0
M _C	200 kg.kmol ⁻¹	T _{ref}	273.15 K	ΔH ₃	-226.3 kJ.kg ⁻¹	m _C (t ₀)	0
M _P	100 kg.kmol ⁻¹	T _{in}	35 °C	A ₀	9.2903 m ²	m _P (t ₀)	0
M _E	200 kg.kmol ⁻¹	c _p	4.184 kJ.kg ⁻¹ .°C ⁻¹	V ₀	2.1052 m ³	m _E (t ₀)	0
M _G	300 kg.kmol ⁻¹	ρ	1000 kg.m ⁻³	U	0.23082 kJ(m ² .°C.s) ⁻¹	m _G (t ₀)	0
A ₁	1.660x10 ³ m ³ kg ⁻¹ s ⁻¹	T _w	100 °C	F _B	5.7840 kg.s ⁻¹	V(t ₀)	2 m ³
						T _r (t ₀)	65 °C

In order to illustrate the application of the algorithm for tuning the Q -matrix, the kinetic parameters E_1 , E_2 and E_3 were chosen as uncertain parameters. A parametric uncertainty of $\pm 5\%$ is assumed. The actual parameter values (“plant parameters”), p , and the nominal parameters, p_{nom} , are reported in Table 2.

Table 2. Uncertain Parameters of Williams-Otto Semibatch Reactor

	E_1	E_2	E_3
p	6333.4 K	7916.3 K	11666.6 K
p_{nom}	6666.7 K	8333.3 K	11111.1 K

The application of the algorithm for tuning the Q -matrix to the Williams-Otto semibatch reactor is shown next.

Results of state estimation: first step of iteration 1

A first state estimation with nominal parameters is performed to provide the information on unmeasured states necessary for the subsequent parameter estimation step. The states and measurements of the Williams-Otto semibatch reactor are

$$x = [m_A \quad m_B \quad m_C \quad m_P \quad m_E \quad m_G \quad V \quad T_r] \quad (38)$$

$$y = [m_B \quad m_E \quad m_G \quad V] \quad (39)$$

The measurements are obtained from a simulation of the plant model with the plant parameters p . The initial guess and the parameters of the state estimation are

$$x_0 = [2000 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 2 \ 65] \quad (40)$$

$$P_0 = 0.0001^2 I_{8 \times 8} \quad (41)$$

$$\Delta t = t_k - t_{k-1} = 31.25 \quad (42)$$

$$R = \text{diag}(0.1^2 \ 0.1^2 \ 0.01^2 \ 0.01^2) \quad (43)$$

$$Q = Q_d = \text{diag}(0.1^2 \ 0.01^2 \ 0.1^2 \ 0.01^2 \ 0.01^2 \ 0.1^2 \ 0.1^2 \ 0.01^2) \quad (44)$$

The state estimation results using the EKF with p_{nom} and a constant-value and diagonal matrix Q_d are shown in Figure 1. As expected, in the presence of a constant parametric model mismatch, the estimated states are biased (cf. Figure. 1b).

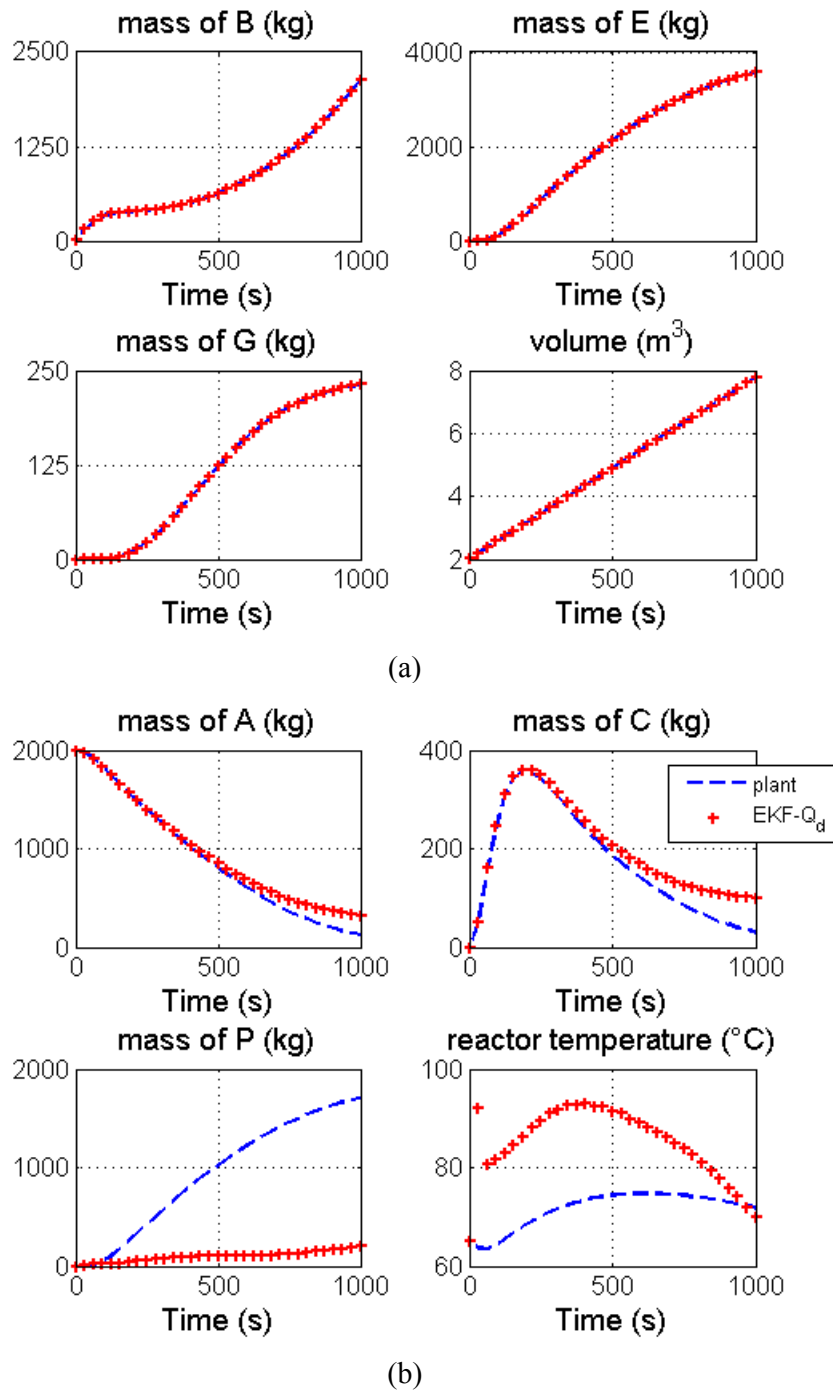


Figure 1. Case Study 1 - EKF with p_{nom} and a constant-value and diagonal matrix Q (Q_d) (a) filtered measured states and (b) estimated states.

Results of parameter estimation step in iteration 1

The SELEST algorithm is used for parameter estimation using p_{nom} as initial guess. The data used to fit the parameters are composed of the estimated states and the filtered measured states resulting from the previous state estimation step. The SELEST algorithm provides p_{est} , C_p and s^2 to be used in the proposed sensitivity and direct methods, as follows:

$$p_{est} = [6333.8 \quad 7957.9 \quad 11223.5] \quad (45)$$

$$C_p = \begin{bmatrix} 3.2469 \times 10^{-5} & -8.6175 \times 10^{-6} & -4.2417 \times 10^{-5} \\ -8.6175 \times 10^{-6} & 3.8060 \times 10^{-5} & 8.2221 \times 10^{-6} \\ -4.2417 \times 10^{-5} & 8.2221 \times 10^{-6} & 3.8060 \times 10^{-5} \end{bmatrix} \quad (46)$$

$$s^2 = \frac{\sum (\hat{Y} - Y_p)^T (\hat{Y} - Y_p)}{\left(\frac{t_f}{\Delta t} + 1\right) - np} = \frac{\sum (\hat{Y} - Y_p)^T (\hat{Y} - Y_p)}{\left(\frac{1000}{31.25} + 1\right) - 3} = 1.66 \times 10^2 \quad (47)$$

Results of state estimation: second step of iteration 1

At this point, state estimation is carried out with a time-varying and non-diagonal matrix Q obtained from C_p . The direct, sensitivity and linear sensitivity methods take p_{est} into account. For the random variation and Monte Carlo methods, Q -matrix is obtained using p_{nom} and the plant parameters take random values around the mean values that are $\pm 5\%$ different from the parameter values used in the process model (p_{nom}). The performance of the EKF using different approaches to calculate Q is compared and the results are shown in Figure 2. The

initial guess (Eq. 40) and the parameters of the state estimation algorithm (Eqs. 41 to 44) remain the same in this step.

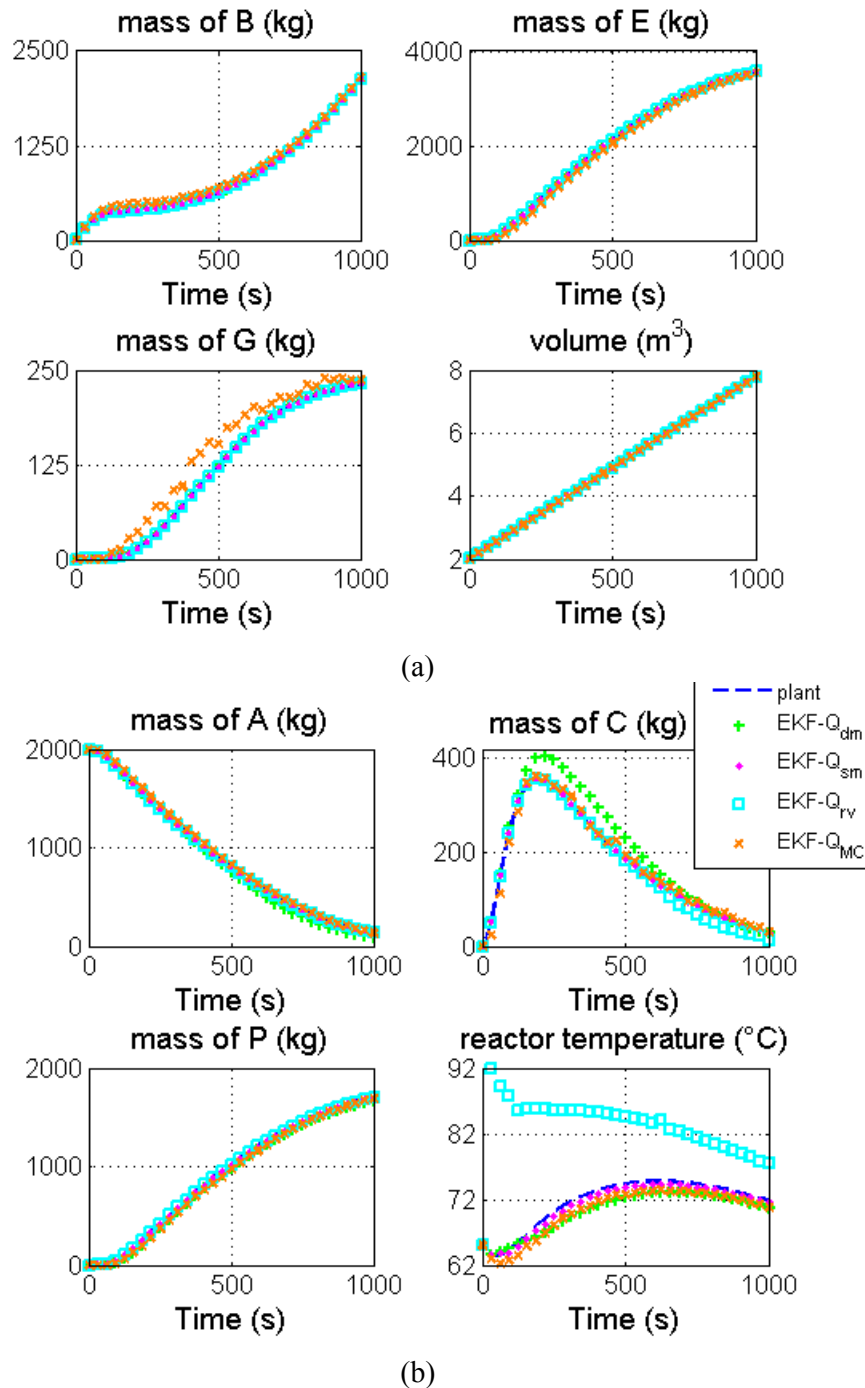


Figure 2. Case Study 1 - First iteration of the algorithm for tuning the Q -matrix. EKF with a time-varying and non-diagonal matrix Q obtained by the proposed methods - direct (Q_{dm}) and sensitivity (Q_{sm}); and by the literature methods - random variation (Q_{rv}) and Monte Carlo (Q_{MC}): (a) filtered measured states and (b) estimated states.

According to Figure 2, the EKF with a time-varying and non-diagonal matrix Q obtained by random variation in plant parameters shows the worst performance. The sensitivity method performs better compared to the direct method. As mentioned before, an advantage of this method is that C_p is time-varying due to the time-varying S . In spite of accounting for the nonlinear dependence of the system on the fitted parameters, the Monte Carlo approach presents a slightly inferior performance than the sensitivity method for the estimated states (Figure 2b) and a performance quite inferior than the sensitivity and the direct methods for the measured states (Figure 2a) despite of the high computational effort spent. As the semibatch reactor process is only mildly non-linear, the linear sensitivity and the proposed sensitivity perform equally well. Avoiding a redundancy, the results for the linear sensitivity method were omitted.

Successive iterations of Q-matrix tuning algorithm

The parameter estimation is now taking place with p_{est} as initial guess for the parameters and with the estimated states and filtered measurements from the first iteration of the proposed algorithm. The parameter estimation results for both methods are given in Table 3.

Table 3. Parameters Estimated by SELEST Algorithm for the Williams-Otto Semibatch Reactor

<i>method</i>	p_{est}			s^2
	E_1	E_2	E_3	
Direct	6328.1	7952.7	11668.9	7.0880
Sensitivity	6333.9	7921.3	11666.3	0.7785

Disregarding numerical round off, C_p is the same for both, the direct and the sensitivity methods:

$$C_p = \begin{bmatrix} 4.9337 \times 10^{-5} & -4.6902 \times 10^{-6} & 4.3956 \times 10^{-6} \\ -4.6902 \times 10^{-5} & 7.7390 \times 10^{-5} & 4.7829 \times 10^{-6} \\ 4.3956 \times 10^{-5} & 4.7829 \times 10^{-6} & 5.0158 \times 10^{-5} \end{bmatrix} \quad (48)$$

As expected, s^2 is smaller for the sensitivity method and it performs better than the direct method in a posterior state estimation step, as shown in Figure 3.

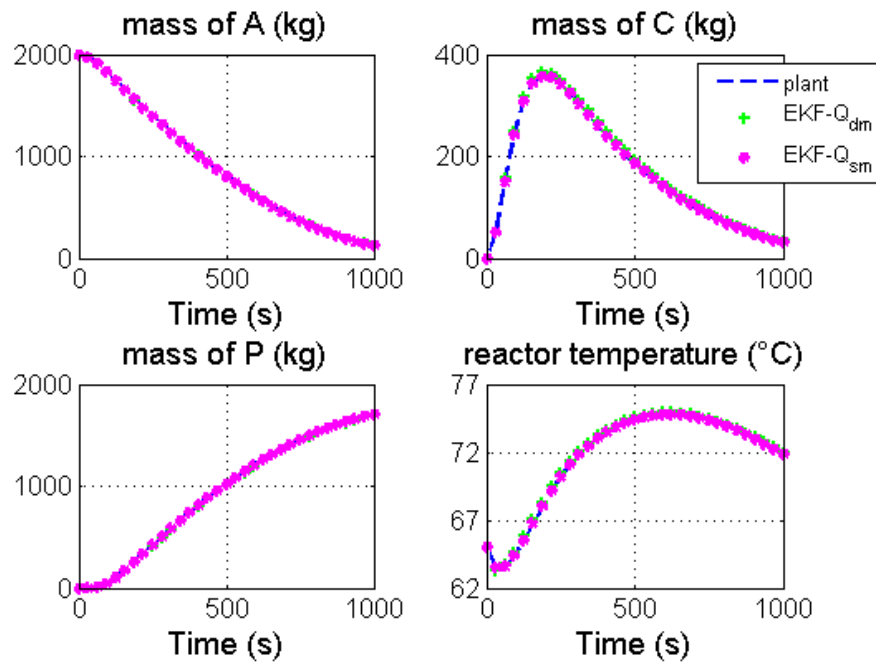
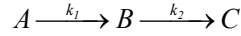


Figure 3. Case Study 1 - Second iteration of the algorithm for tuning the Q -matrix: estimated states for the EKF with p_{est} and a time-varying and non-diagonal matrix Q obtained by the direct (Q_{dm}) and the sensitivity (Q_{sm}) methods.

For this example, a third iteration of the algorithm did not improve significantly the state estimation accuracy.

Case study 2: CSTR with output multiplicity

In this section, we evaluate the performance of the proposed methods for the case where the EKF model is structurally different from that of the simulated plant. As benchmark example, we have chosen a CSTR, as introduced by Torres and Tlacuahuac¹⁹. The following two exothermic irreversible first-order reactions in series take place in the reactor:



Reactor volume and physical parameters are assumed to remain constant; perfect mixing is also assumed. In addition the dynamics of the cooling jacket is taken into account.

The dimensionless model equations are given below.

$$\frac{dx_1}{d\tau} = q(x_{1f} - x_1) - x_1 \eta(x_3) \phi \quad (49)$$

$$\frac{dx_2}{d\tau} = q(x_{2f} - x_2) - x_2 \phi S \eta_2(x_3) + x_1 \phi S \eta(x_3) \quad (50)$$

$$\frac{dx_3}{d\tau} = q(x_{3f} - x_3) - \delta(x_4 - x_3) + \beta \phi [x_1 \eta(x_3) + \alpha x_2 \eta_2(x_3) S] \quad (51)$$

$$\frac{dx_4}{d\tau} = \delta_1 (q_c (x_{4f} - x_4) + \delta \delta_2 (x_3 - x_4)) \quad (52)$$

where x_1 is the dimensionless concentration of reactant A , x_2 is the dimensionless concentration of reactant B , x_3 is the dimensionless reactor temperature, and x_4 is the dimensionless cooling jacket temperature. More details on the model can be found elsewhere.¹⁹

In this work, the term “simplified model” stands for the CSTR model without including the jacket energy balance (Eqs. 49-51), whereas the term “full model” will refer to the CSTR model including the jacket energy balance (Eqs. 49-52). While the dimensionless cooling water volumetric flowrate, q_c , is the manipulated variable for the full model, x_4 is the manipulated variable for the simplified model.

Torres & Tlacuahuac (2000) have analyzed input/output multiplicities of the full model using q_c as continuation parameter. In the bifurcation diagram of Figure 4, five steady-states and a bifurcation point were observed for x_3 when $q_c=2.3$. The parameters used for generating Figure 4 are shown in Table 4.

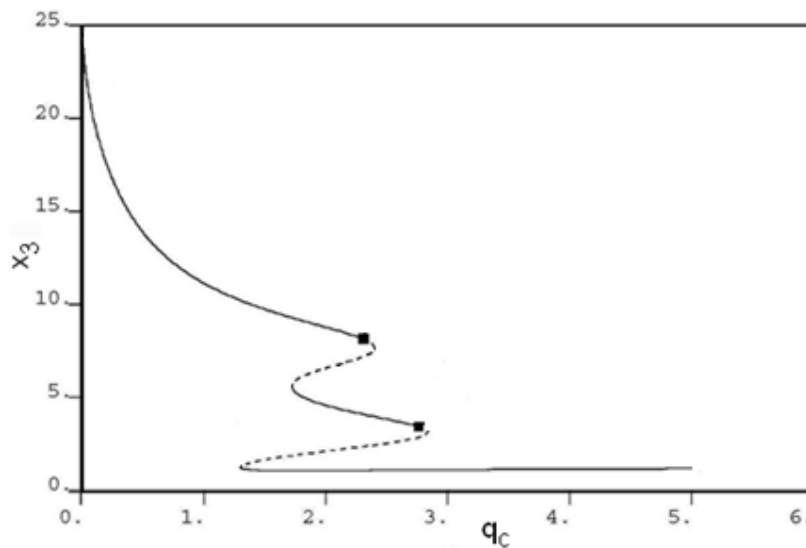


Figure 4. Bifurcation diagram of CSTR with two Hopf bifurcation points and five steady states: (—) stable steady state, (- - -) unstable steady state, (■) Hopf bifurcation.

Table 4. CSTR Full Model Parameters Values¹⁹

	δ	q	α	S	ψ	δ_1	δ_2	γ	x_{1f}	x_{2f}	x_{3f}	x_{4f}
P (full model)	1	1	1	0.01	1	10	1	1000	1	0	0	-1

In order to evaluate the performance of the algorithm for tuning the matrix Q for a case study with model structure uncertainty, the following assumptions were taken into account:

1. While the simplified model is used in EKF, the full model is used as the simulated plant.
2. x_1 and x_2 are assumed to be measured and x_3 is the state to be estimated.
3. A parametric uncertainty in parameters β and Φ of +2% and -20%, respectively, is assumed in the simplified model in order to drive x_3 to another steady-state. The parameter values of the full model p (“plant parameters”) and of the simplified model p_{nom} (“nominal parameters”) are reported in Table 5.

Table 5. Uncertain Parameters of CSTR

	β	Φ
p	8	0.133
p_{nom}	8.16	0.1064

The application of the algorithm for tuning the matrix Q to the CSTR is shown below.

Results of state estimation: first step of iteration 1

We define the state and measurements to be

$$x = [x_1 \quad x_2 \quad x_3] \quad (53)$$

$$y = [x_1 \quad x_2] \quad (54)$$

We consider state estimation with the following parameters:

$$x_0 = [0.01 \quad 0.2 \quad 8] \quad (55)$$

$$P_0 = 0.001^2 I_{3 \times 3} \quad (56)$$

$$\Delta t = t_k - t_{k-1} = 0.1 \quad (57)$$

$$R = \text{diag}(0.00001^2 \quad 0.001^2) \quad (58)$$

$$Q_0 = 0.1^2 I_{3 \times 3} \quad (59)$$

The state estimation results using the EKF with p_{nom} and a constant-value and diagonal Q matrix are shown in Figure 5. Even with an accurate estimation of the measured states, the estimated state has converged to an incorrect steady-state (cf. Figure 5b).

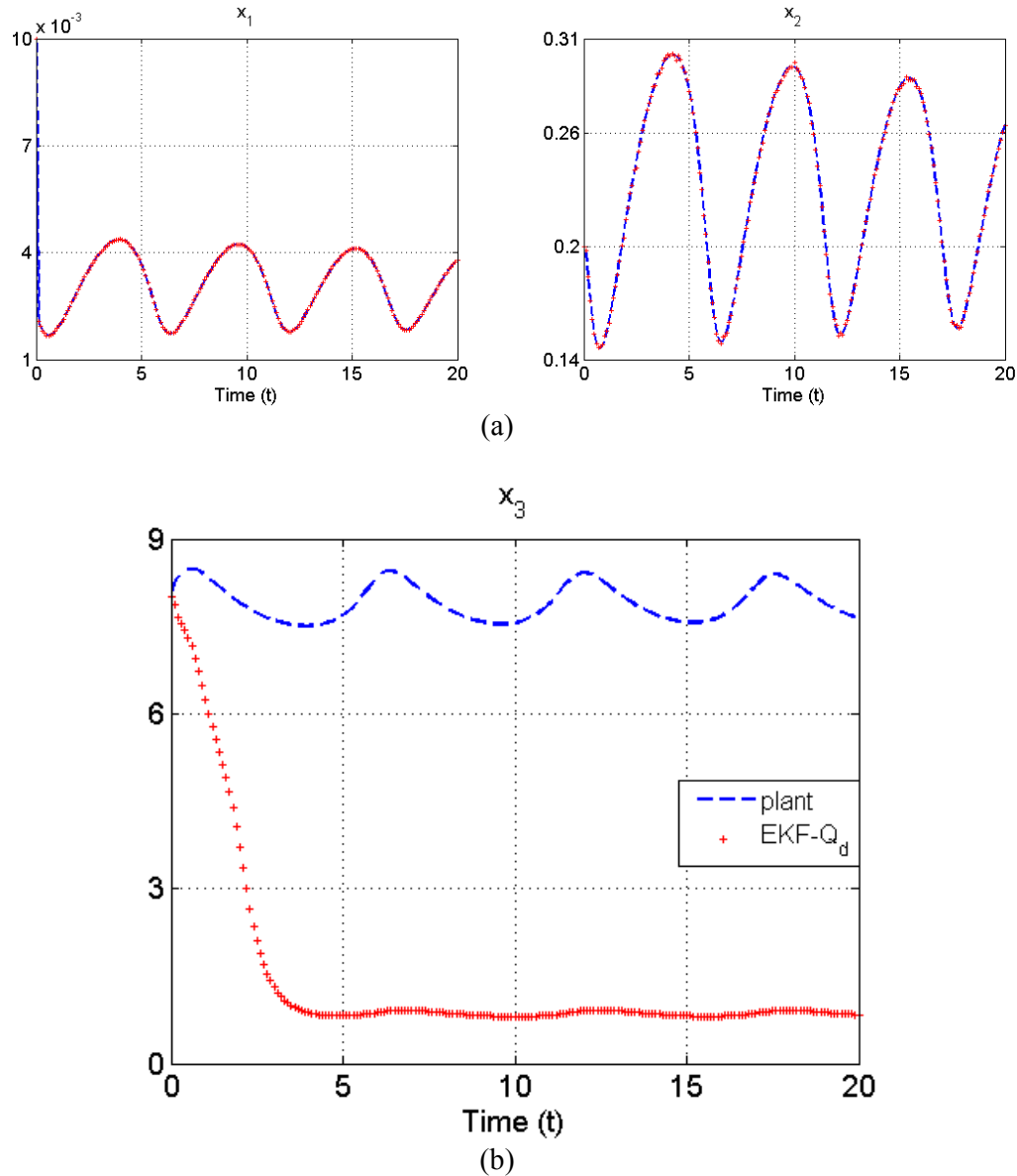


Figure 5. Case Study 2 - EKF with p_{nom} and a constant-value and diagonal matrix Q (Q_d): (a) filtered measured states and (b) estimated state.

Results of the parameter estimation step in iteration 1

Likewise for the case study 1, the parameter estimation step using the SELEST algorithm takes place with p_{nom} and with the data set composed by the estimated states and the filtered measured states resulting from the previous state estimation step. The results are

$$p_{est} = [0.0153 \quad 11.2097] \quad (60)$$

$$C_p = \begin{bmatrix} 0.0108 \times 10^{-3} & -0.0469 \times 10^{-3} \\ -0.0469 \times 10^{-3} & 0.2278 \times 10^{-3} \end{bmatrix} \quad (61)$$

$$s^2 = \frac{\sum (\hat{Y} - Y_p)^T (\hat{Y} - Y_p)}{\left(\frac{t_f}{\Delta t} + 1\right) - np} = \frac{\sum (\hat{Y} - Y_p)^T (\hat{Y} - Y_p)}{\left(\frac{20}{0.1} + 1\right) - 2} = 8.7814 \times 10^{-5} \quad (62)$$

Results of state estimation: second step of iteration 1

The second state estimation step is carried out with p_{est} , C_p and s^2 obtained from the parameter estimation step and with the same initial guess (Eq. 55) and parameters of the state estimation algorithm (Eqs. 56 to 59) used in the first one. As mentioned before, the linear sensitivity and sensitivity methods have performed equally well in the first case study. Thus, we have selected this literature method to be applied in the case study 2 in order to show the advantage of the proposed methods over it. The EKF with the proposed sensitivity and direct methods; and by the literature linear sensitivity method are compared in Figure 6.

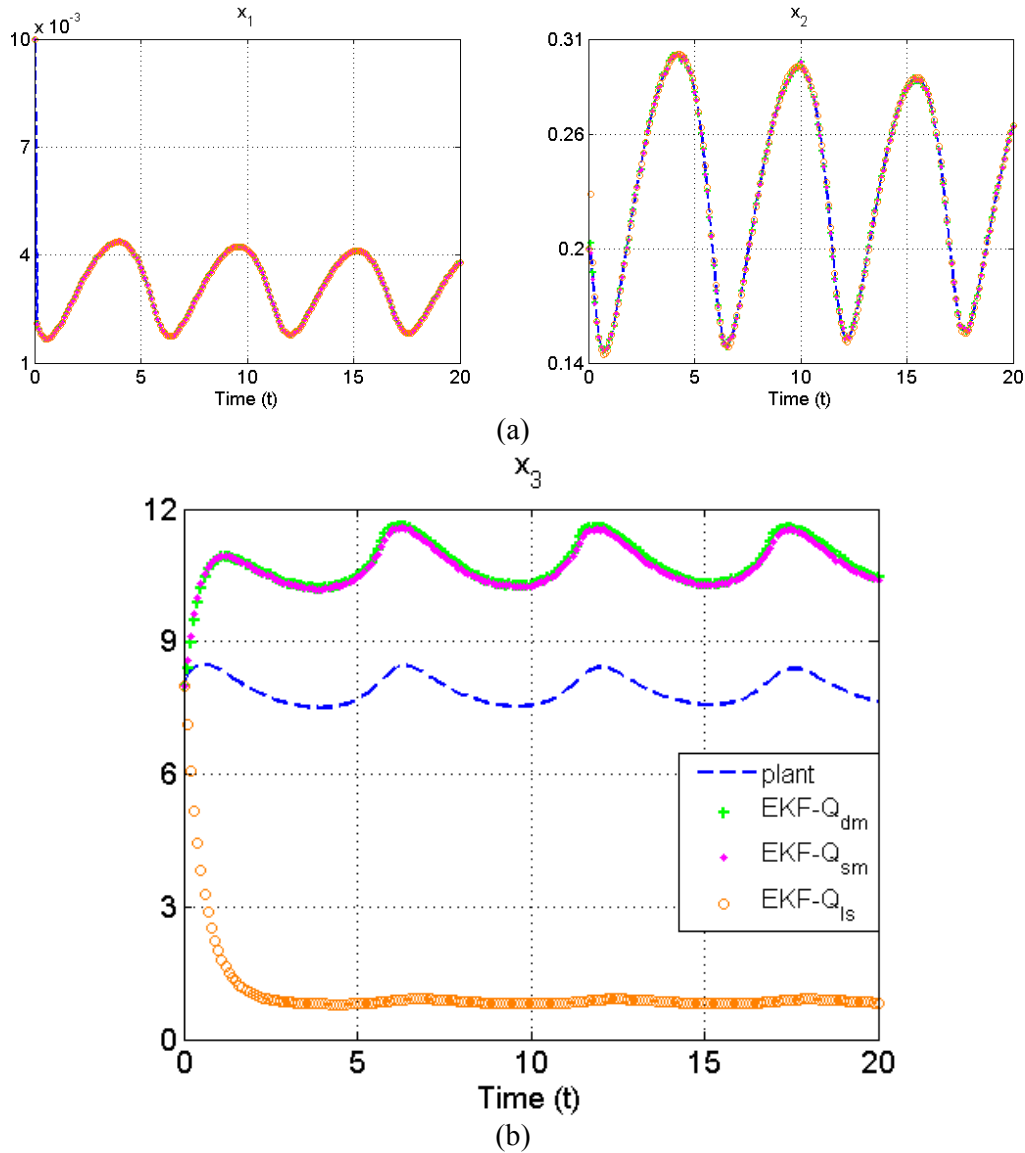


Figure 6. Case Study 2 - First iteration of the algorithm for tuning the Q -matrix: EKF with p_{est} and a time-varying and non-diagonal matrix Q obtained by the proposed methods - direct (Q_{dm}) and sensitivity (Q_{sm}); and by the literature method - linear sensitivity method (Q_{ls}): (a) filtered measured states and (b) estimated state.

Different from the semibatch reactor case, the EKF with a time-varying and non-diagonal matrix Q obtained by the linear sensitivity method shows a very poor performance in this case. As the CSTR presents a complex nonlinear behavior, the specification of a linear parameter covariance matrix in the linear sensitivity method renders this method inappropriate for such systems. Because the nonlinear dynamic effects were neglected, the

estimated state x_3 converged to an incorrect steady-state (cf. Figure 6b). Note that the estimated state x_3 converged to the same steady-state as the one resulting from the EKF with p_{nom} and a constant-diagonal matrix Q in the first state estimation step, as shown in Figure 5b.

The estimation of x_3 is quite biased for the proposed methods, as can be also seen in Figure 6b. However, the sensitivity method performs slightly better than the direct method and, hence, we have selected it to be used in the successive iterations of the algorithm for the tuning of the matrix Q .

Successive iterations of Q -matrix tuning algorithm

The unmeasured states are unknown in practical applications, the algorithm for the tuning of the matrix Q has to be executed iteratively until the state estimation accuracy cannot be improved beyond a tolerance ε anymore.

In order to provide a sufficiently accurate filter performance, successive iterations of Q -matrix tuning algorithm are carried out using the EKF with a matrix Q obtained by the proposed sensitivity method. A very strict tolerance of $\varepsilon = \pm 1\%$ was chosen as a stopping criterion because it allows to analyze precisely the improvement of the state estimates with the number of Q -matrix tuning algorithm iterations.

Table 6 shows the parameters estimated by the SELEST for each Q -matrix tuning algorithm iteration. The performance of the EKF along the Q -matrix tuning algorithm iterations can be seen in Figure 7.

Table 6. Parameters Estimated by the SELEST Algorithm in Successive Iterations of the Algorithm for Tuning the Q -Matrix for the CSTR

<i>Iteration</i>	<i>p_{est}</i>		<i>s²</i>
	β	Φ	
1	0.0153	11.2097	8.7814×10^{-5}
2	0.0913	10.0105	1.9665×10^{-5}
3	0.1071	9.0573	8.2659×10^{-6}
4	0.1097	8.5984	1.0559×10^{-5}
5	0.1148	8.2986	4.6932×10^{-6}
6	0.1215	8.1476	1.6681×10^{-6}
7	0.1288	8.0586	6.8683×10^{-6}
8	0.1337	8.0054	3.2335×10^{-7}

Considering the tolerance $\varepsilon = \pm 1\%$, eight algorithm iterations were necessary to improve the EKF performance. The improvement of state estimation was of -1.01% from the iteration #6 to the iteration #7 and of -0.61% from iteration #7 to #8. Thus, the algorithm could be stopped before.

Disregarding round-offs, the parameters estimated by the SELEST algorithm in iteration #8 correspond to the full model parameters (“plant parameters”). Furthermore, the estimated state x_3 converges to its actual value, obtained by the full model simulation.

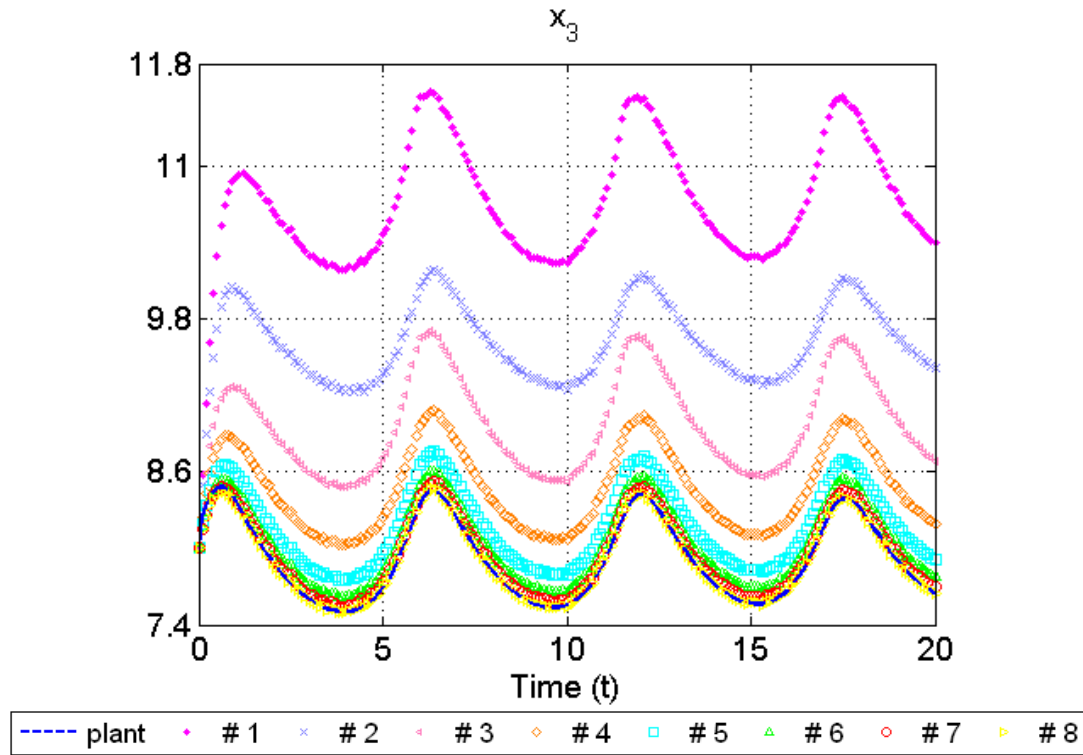


Figure 7. Case Study 2 – Successive iterations of the algorithm for tuning the Q -matrix: estimated states for the EKF with p_{est} and a time-varying and non-diagonal matrix Q , obtained by the sensitivity method (Q_{sm}) after eight iterations of the Q -matrix tuning algorithm.

Conclusions

A new process-noise covariance matrix tuning algorithm is presented which incorporates the linearization approach proposed by Valappil and Georgakis^{3,4} with two new methods for the parameter covariance matrix computation. As pointed out by Valappil and Georgakis,^{3,4} the investment in a non-diagonal time-varying matrix Q is justified because (a) parametric uncertainties cause significant cross-correlations between the process noises for different states and (b) for continuous or batch processes with time-varying process dynamics and operating on wide range of process conditions, the noise statistics are time varying.

The algorithm for tuning the Q -matrix tuning consists of two state estimation steps and a parameter estimation step in between. A first state estimation with nominal parameters is performed to provide information on unmeasured states to be used in the subsequent parameter estimation step. Afterwards, state estimation is carried out with the estimated parameters and a time-varying and non-diagonal tuning of matrix Q obtained from the matrix C_p , evaluated by one of the proposed methods, the direct or the sensitivity. In the direct method, C_p is assumed to be constant and directly obtained from the parameter estimation step using the SELEST algorithm¹⁰. In the sensitivity method, C_p is obtained from the computation of the time-varying sensitivity matrix. Although the EKF with a time-varying and non-diagonal matrix Q obtained from the sensitivity method performs slightly better compared to the direct method, both methods can be successfully applied for state estimator design. Moreover, these methods improve considerably the EKF performance when compared to (a) to the case of a constant-value and diagonal matrix Q in the presence of constant parametric uncertainty, to (b) the case where the EKF model is structurally different from that of the (simulated) plant and to (c) the methods of prior publications. Successive iterations of the algorithm for tuning the Q -matrix improve the state estimation accuracy. While for the Williams Otto semibatch reactor – a mildly nonlinear system - only two iterations were needed to improve the state estimation accuracy significantly, for the CSTR – a highly nonlinear system with output multiplicity - eight iterations were required to converge.

The algorithm presented in this work can be applied on-line in industrial practice. Beyond online EKF tuning, the process model is also updated on-line due to the integration of the state and the parameter estimation steps. The direct method is computationally less demanding than the sensitivity method, and might be preferable because it resulted – at least

in our examples – in comparable accuracy. Furthermore, the algorithm eliminates an off-line, exhaustive, and inexact tuning of EKF by trial-and-error.

Acknowledgments

The first author would like to acknowledge the financial support from the German Academic Exchange Service (DAAD) and from PETROBRAS S.A.

Appendix: Select algorithm

Predictability degradation index: accounts for the fact the variability of the prediction is expected to increase when the optimum number of selected parameters is overcome.

Parameter correlation degradation index: avoids the selection of an unnecessarily high number of parameters, which would increase the correlation between the parameters.

The iterative algorithm is as follows. Details about formulation are found in Secchi et al.¹⁰ (2006).

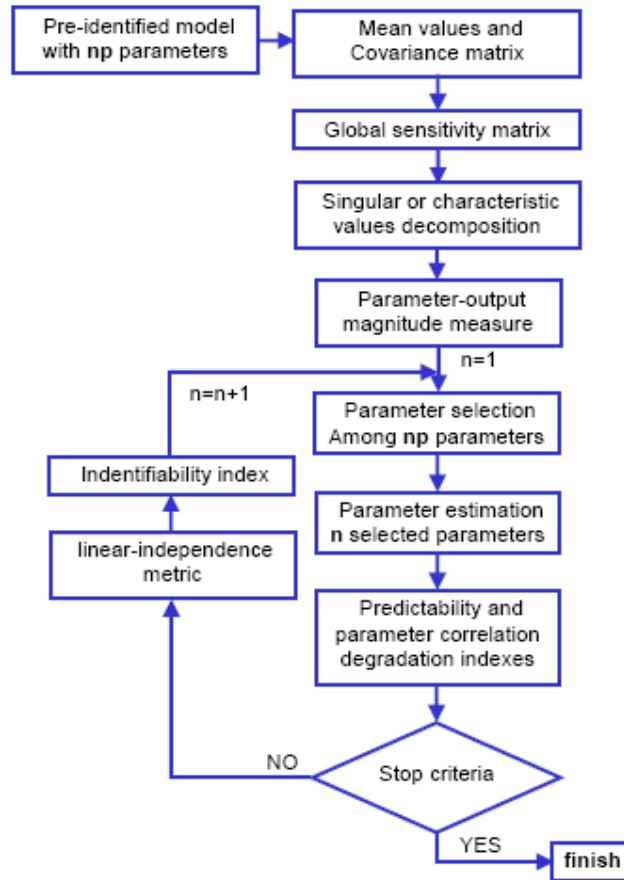


Figure 8. SELEST Algorithm structure.

The algorithm stops when there is no improvement in the model predictability or there is degradation in the parameters correlation matrix.

Literature Cited

1. Odelson, BJ, Lutz, A, Rawling, JB. The Autocovariance Least-Squares Method for Estimating Covariances: Application to Model-Based Control of Chemical Reactors. *IEEE Transactions on Control Systems Technology* 2006; 14: 532-540.
2. Mehra, RK. Approaches to Adaptive Filtering. *IEEE Trans. Automat. Contr.* 1972; 17: 693-698.

3. Valappil J, Georgakis C. A Systematic Tuning Approach for the Use of Extended Kalman Filters in Batch Processes. *Proceedings of the American Control Conf., IEEE Press*; 1999; San Diego.
4. Valappil J, Georgakis C. Systematic Estimation of State Noise Statistics for Extended Kalman Filters. *AIChE J.* 2000; 46: 292-398.
5. Leu G, Baratti R. An Extended Kalman Filtering Approach with a Criterion to set its Tuning Parameters; Application to a Catalytic Reactor. *Computers & Chemical Engineering* 2000; 23: 1839-1849.
6. Fotopoulos J, Georgakis C, Stenger H. Use of Tendency Models and their Uncertainty in the Design of State Estimators for Batch Reactors. *Chemical Engineering and Processing* 1998; 37: 545-558.
7. Valappil J, Georgakis C. State Estimation and Nonlinear Model Predictive Control of End-use Properties in Batch Reactors. *Proceedings of the American Control Conf., IEEE Press*; 2001; Arlington.
8. Valappil J, Georgakis C. Nonlinear Model Predictive Control of End-Use Properties in Batch Reactors. *AIChE J.* 2000; 48: 2006-2021.
9. Nagy Z K, Braatz RD. Robust Nonlinear Model Predictive Control of Batch Processes. *AIChE J.* 2003; 49: 1776- 1786.
10. Secchi AR, Cardozo NSM, Almeida No E, Finkler TF. An algorithm for automatic selection and estimation of model parameters. *Proceedings of International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes, ADCHEM 2006*; 2006; Gramado.
11. Li R, Henson MA, Kurtz MJ. Selection of Model Parameters for Off-Line Parameter Estimation. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 2004; 12: 402-412.
12. Simon, D. *Optimal State Estimation: Kalman, H Infinity, and Nonlinear Approaches*. New Jersey: Wiley-Interscience; 2006.

-
13. Jazwinski, AH. *Stochastic Processes and Filtering Theory*. New York: Academic Press; 1970.
 14. Caracotsios M, Stewart WE. Sensitivity analysis of initial value problems with mixed ODEs and algebraic equations. *Computers & Chemical Engineering* 1985; 9: 359-365.
 15. Li S, Petzold L, Zhu W. Sensitivity analysis of differential-algebraic equations: A comparison of methods on a special problem. *Applied Numerical Mathematics* 2000; 32: 161-174.
 16. Schlegel M, Wolfgang M, Ehrig R, Nowak U. Sensitivity analysis of linearly-implicit differential-algebraic systems by one-step extrapolation. *Applied Numerical Mathematics* 2004; 48: 83-102.
 17. Sharma MS, Arora ND. Optima: A Nonlinear Model Parameter Extraction Program with Statistical Confidence Region Algorithms. *IEEE Trans. Comp. Aided Des. Int. Circuits Syst.* 1993; 12: 982-987.
 18. Forbes JF. *Model Structure and Adjustable Parameter Selection for Operations Optimizations*. PhD Thesis. Hamilton, McMaster University; 1994.
 19. Torres AEG, Tlacuahuac AF. Effect of process modeling on the nonlinear behaviour of a CSTR Reactions $A \rightarrow B \rightarrow C$. *Chemical Engineering Journal* 2000; 77: 153-164.

Capítulo 7

Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

Este capítulo apresenta as principais contribuições deste trabalho de tese e as possíveis direções para trabalhos futuros.

Conclusões

Técnicas de controle avançado de processos tem se tornado amplamente populares em aplicações de processos químicos nos últimos anos. O sucesso da implementação destas técnicas depende da informação a respeito das variáveis do sistema dinâmico não-linear, a qual é usada nas predições sobre o futuro. Visto que nem todas as variáveis do sistema serão medidas ou, pelo menos, freqüentemente medidas em aplicações práticas, a estimação de estados é vista como um ingrediente chave do controle avançado de processos.

A função de um estimador de estados é combinar as medições disponíveis com o modelo do sistema para inferir ou estimar o vetor de estados e, com isso, produzir informação a respeito dos valores das variáveis desconhecidos. Esta tarefa, porém, não é tão simples, pois todo o sistema está sujeito a distúrbios e incertezas que são difíceis de serem modelados e que precisam ser considerados na implementação do estimador.

Desta forma o principal objetivo desta tese foi elaborar uma abordagem sistemática para construção e sintonia de estimadores de estados não-lineares considerando os diferentes tipos de incertezas e limitações intrínsecos a três fontes básicas de informação: medidas disponíveis, um modelo matemático representativo e as estatísticas do ruído (processo e medida). As principais contribuições deste trabalho estão apresentadas nos Capítulos 3 a 6 desta tese e serão a seguir destacadas:

Capítulo 3

O algoritmo proposto para a seleção do número mínimo de medidas necessárias para tornar todos os estados de um sistema observáveis foi exemplificado e apresentou bom desempenho com o modelo do reator semi-batelada Williams-Otto. Embora o algoritmo seja recomendado para o caso de reatores batelada e semi-batelada nos quais é possível que o conjunto de medidas que garantam a observabilidade mude ao longo da batelada, esta mudança não foi observada com o estudo de caso do reator semi-batelada Williams-Otto.

O aumento do vetor de estados com parâmetros para tornar possível uma estimação simultânea de estados e parâmetros foi visto como uma alternativa ruim, uma vez que as equações diferenciais adicionais dos parâmetros aumentam o número de estados a serem estimados, tornando mais difícil a obtenção de um sistema completamente observável e exigindo um número maior de medições.

O reator semi-batelada Williams-Otto foi representado por duas definições diferentes de estados e os resultados obtidos mostraram que as matrizes Q e R sintonizadas para uma dada definição de estados (base mássica) podem ser convertidas com sucesso em uma outra (base de fração mássica), proporcionando um desempenho comparável do EKF. Recomenda-se, entretanto, optar por modelos cujos estados sejam fracamente correlacionados para simplificar a sintonia dos estimadores.

Principais contribuições:

- Método para converter as matrizes de covariância dos ruídos entre diferentes definições dos estados do modelo para que resultados similares da estimação de estados possam ser obtidos.
- Algoritmo para a seleção do melhor e menor número de medidas necessárias para tornar todos os estados de um sistema observáveis.

Capítulo 4

Os estimadores de estados estão entre as ferramentas mais importantes para a melhoria operacional de biorreatores. Neste capítulo se mostrou a sua aplicação para a estimação e controle de um biorreator destinado à produção do etanol utilizando a bactéria *Zymomonas mobilis*. Mostrou-se que os estimadores de estado apresentam um bom desempenho nas seguintes aplicações: monitoramento, no controle retroalimentado, no ajuste de parâmetros e na reconciliação de dados transiente.

Foi visto que devido à possibilidade de incorporar restrições em um problema de otimização, o MHE e o CEKF apresentam melhores resultados quando comparados com o clássico EKF. Apesar do MHE e do CEKF apresentarem desempenhos comparáveis após a convergência para os valores reais dos estados, foi visto que o MHE é mais robusto no caso de estimativas ruins das condições iniciais dos estados e de sua respectiva matriz de

covariância. Devido à alta demanda computacional do MHE, buscou-se agregar mais informações ao CEKF (mais simples e computacionalmente menos exigente) de modo que resultados comparáveis ao MHE fossem obtidos neste caso. Assim, foi proposta a formulação de um novo estimador de estados referenciado como CEKF&S que permite estimar valores passados com base em todas as medições disponíveis. Conforme os resultados obtidos, o CEKF&S conciliou um desempenho comparável ao MHE com uma considerável redução no processamento computacional.

Principais contribuições:

- Aplicação dos estimadores de estados no monitoramento, no controle retroalimentado, no ajuste de parâmetros e na reconciliação de dados transientes.
- Formulação de um novo estimador de estados referenciado como CEKF&S.

Capítulo 5

A robustez numérica das matrizes de covariância dos estados de três formulações sem restrição (EKF, DEKF e EKF-CRE) e uma formulação com restrição (CEKF) foram avaliadas através de dois exemplos da engenharia química que apresentam multiplicidade de soluções: a) um reator batelada com reações reversíveis no qual a relação entre o modelo e as medidas do sistema produz múltiplos estados que satisfazem a condição de equilíbrio e b) um reator CSTR com reações exotérmicas irreversíveis e balanço de energia da camisa de resfriamento no qual o comportamento não-linear inclui múltiplos estados estacionários e ciclos limites.

Para ambos os exemplos estimativas ruins da condição inicial dos estados e de sua respectiva matriz de covariância foram consideradas. No primeiro exemplo observou-se que um pequeno distúrbio no ruído de medida proporcionou desempenhos bem diferentes para os estimadores sem restrição avaliados. Enquanto o DEKF convergiu para estados fisicamente inviáveis, o EKF-CRE e o RREKF evitaram um aumento na propagação do erro devido a este distúrbio, sendo capazes de convergir para os estados desejáveis no tempo final da batelada. Durante a batelada, entretanto, ambas as formulações não foram capazes de evitar estados fisicamente inviáveis. O segundo exemplo apresentou resultados similares ao primeiro, embora nenhuma perturbação tenha sido feita.

Foi visto também que mesmo que o DEKF seja constricto por uma estratégia de corte (*clipping*) que evita estados indesejáveis, os resultados obtidos são inferiores aos do CEKF. Ao contrário da formulação do DEKF com estratégia de corte (*clipped EKF*), o CEKF incorpora as restrições em um problema de otimização que minimiza o ruído em termos de mínimos quadrados, preservando a sua gaussianidade e evitando que este seja mal distribuído. Conclui-se, assim, que o CEKF é a melhor escolha entre as formulações avaliadas para tais estudos de caso. Os resultados também mostraram que, embora o MHE forneça maior robustez para estimativas ruins dos estados iniciais, convergindo mais

rapidamente para os estados reais, esta formulação não é justificada para os estudos de caso em questão devido ao elevado custo computacional.

Principais contribuições:

- Estratégias para evitar “armadilhas” na implementação de um estimador de estados considerando problemas de divergência e atualização da matriz de covariância de estados;
- Mostrou-se como a resolução de um problema de otimização com restrições evita estimativas fisicamente inviáveis dos estados em exemplos com multiplicidade de soluções, preservando a gaussianidade dos ruídos o que evita que estes sejam mal distribuídos.

Capítulo 6

Um novo algoritmo para a sintonia da matriz de covariância do ruído de processo é apresentado neste capítulo. Este algoritmo consiste basicamente em duas etapas de estimação de estados com uma etapa intermediária de estimação de parâmetros. A etapa anterior da estimação de estados tem por objetivo fornecer informação a respeito dos estados não-medidos para ser usada na subsequente etapa de estimação de parâmetros. A seguir, a etapa posterior da estimação de estados é feita com os parâmetros estimados e uma matriz Q não-diagonal e variante no tempo obtida por um dos dois métodos propostos para o cálculo da matriz de covariância dos parâmetros: método direto e método da sensibilidade. Enquanto no método direto a matriz de covariância dos parâmetros é obtida diretamente na etapa de estimação de parâmetros com o algoritmo SELEST (apresentado no Apêndice), no método da sensibilidade esta matriz é obtida pelo cálculo da matriz de sensibilidade variante no tempo.

A aplicação do algoritmo com os dois métodos propostos para o cálculo da matriz de covariância dos parâmetros foi ilustrada em dois exemplos com incertezas e graus de não-linearidade distintos. O primeiro exemplo é o reator semi-batelada Williams-Otto que apresenta incerteza paramétrica e um grau de não-linearidade moderado. O segundo exemplo é um reator CSTR com reações exotérmicas irreversíveis e balanço de energia da camisa de resfriamento que apresenta incerteza estrutural e um grau de não-linearidade acentuado. Enquanto duas iterações do algoritmo foram suficientes para obter uma estimativa precisa dos estados, oito iterações do algoritmo foram necessárias no segundo exemplo.

Embora resultados ligeiramente melhores tenham sido obtidos quando o EKF foi executado com uma matriz Q não-diagonal e variante no tempo obtida pelo método da sensibilidade, ambos os métodos propostos para o cálculo da matriz de covariância dos parâmetros podem ser aplicados de maneira eficiente no projeto do estimador de estados. O método direto é mais simples e computacionalmente menos exigente e, por isso, deve ser considerado como primeira opção na aplicação do algoritmo.

Principais contribuições:

- Algoritmo para a sintonia da matriz de covariância do ruído de processo (i.e., matriz Q) para estimadores de estados fundamentados na filtragem de Kalman.
- Dois métodos para o cálculo da matriz de covariância dos parâmetros referenciados como método direto e de sensibilidade.

Sugestões para trabalhos futuros

Aplicação prática do algoritmo de sintonia da matriz de covariância do ruído de processo

A viabilidade prática do algoritmo proposto para a sintonia da matriz de covariância do ruído de processo deve ser comprovada com dados experimentais reais. Em um primeiro momento, o algoritmo será aplicado considerando os dados de fermentação contínua de *Zymomonas mobilis* gerados no Laboratório de Bioprocessos da Universidade de Caxias do Sul e o modelo deste processo (discutido no Capítulo 4) para a obtenção das estimativas dos estados não-medidos e dos parâmetros. A aplicação em linha do algoritmo que também pode ser usado para a atualização em linha de modelos será possível após a entrada em operação de uma unidade de fermentação de *Zymomonas mobilis* no Laboratório de Controle e Integração de Processos (LACIP/GIMSCOP) do Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Estratégia eficiente de estimação de estados baseada em otimização

Visto que o MHE trabalha com uma trajetória de medidas ao invés de trabalhar apenas com as medidas de um único instante de tempo, este é mais adequado que o CEKF (MHE com um comprimento de horizonte nulo) para lidar com estimativas ruins das condições iniciais dos estados e sua respectiva covariância; e com distúrbios do processo. Foi visto neste trabalho que para exemplos sujeitos a múltiplos estados de equilíbrio ou múltiplos estados estacionários, o CEKF falha na tentativa de convergir rapidamente para os estados verdadeiros. Entretanto, após a convergência, o desempenho destes estimadores é muito similar. Deste modo, poderia ser estudada uma estratégia adaptativa para a seleção do comprimento do horizonte de otimização do MHE. O comprimento do horizonte só seria aumentado para o uso do MHE caso a diferença entre a medida real e a medida estimada (ou filtrada) fosse maior que um valor de tolerância pré-estabelecido, caso contrário, o CEKF continuaria sendo usado. Esta abordagem tem potencial para ser bastante eficaz para lidar com as situações mencionadas anteriormente enquanto exige apenas um tamanho mínimo de comprimento do horizonte, reduzindo o custo computacional em linha. Este algoritmo

poderia ser então comparado com o CEKF&S proposto nesta tese, para ver se realmente existe algum ganho a ser alcançado.

Apêndice

Algoritmo para a seleção automática e estimação dos parâmetros do modelo - SELEST

**AN ALGORITHM FOR AUTOMATIC SELECTION AND ESTIMATION OF MODEL PARAMETERS****Argimiro R. Secchi¹, Nilo Sérgio M. Cardozo², Euclides Almeida Neto³, Tiago F. Finkler⁴**

*1,2,4 - Grupo de Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos (GIMSCOP)
Departamento de Engenharia Química – Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Rua Sarmiento Leite, 288/24 – CEP: 90050-170 – Porto Alegre –RS – Brazil
Phone: +55-51-3316-3528 – Fax: +55-51-3316-3277
3 - PETROBRAS S/A – Brazil
E-mail: {¹arge, ²nilo, ⁴tiago}@enq.ufrgs.br, ³ean@petrobras.com.br*

Abstract: An algorithm for automatic selection and estimation of model parameters is presented. The algorithm uses a sensitivity matrix based calculation of the parameters effects on the measured outputs and of a linear-independence metric. A predictability degradation index and a parameter correlation degradation index are used as stop criteria and the method is extended to dynamic models and multiple operating points. The applicability of the developed algorithm is illustrated through a hypothetical nonlinear input-output model and through the analysis of data from an experimental isothermal batch bioreactor. The obtained results show the effectiveness of the algorithm. *Copyright © 2006 IFAC.*

Keywords: Parameter Estimation, Sensitivity Matrix, Parameter Selection, Principal Component Analysis.

1. INTRODUCTION

Parameter estimation constitutes a key step in the identification and calibration of models. However, often only a subset of the parameters of the model can be estimated, due to limitations in the experimental window and the amount of data. In such a situation, the quality of the estimation is strongly dependent on the selection of the subset of parameters to be estimated. Consequently, a reasonable amount of effort has been made to automating the selection of parameters through the development of adequate criteria and procedures to the execution of this task (Weijers and Vanrolleghem, 1997; Brun *et al.*, 2002; Calvello and Finno, 2004; Ioslovich *et al.*, 2004; Li *et al.*, 2004).

Analysis of sensitivity has proven to be a valuable tool for identifying relevant and uncorrelated parameters. Different strategies based on the use of the sensitivity matrix have been proposed (Weijers and Vanrolleghem, 1997; Li *et al.*, 2004). A particularly systematic and effective identifiability measure method has been proposed by Li *et al.*

(2004). In this method the magnitude of each parameter effect on the measured variables is quantified by applying principal-component analysis to a steady-state parameter-output local sensitivity matrix and the determination of the least uncorrelated parameters is accomplished recursively by computing the minimum distance between the sensitivity vector of a candidate parameter and the vector spaces spanned by sensitivity vectors of the parameters already selected for estimation.

Although the method proposed by Li *et al.* (2004) provides an effective ranking of the parameters of a given model, it does not provide criteria to the determination of the optimum number of parameters to be selected for the parameter estimation.

In this work, an algorithm for automatic selection of model parameters based on an extension of the identifiability measure of Li *et al.* (2004) is presented. In this algorithm a predictability degradation index and a parameter correlation degradation index are proposed to be used as stop

criteria. Additionally, the method is extended to dynamic models and multiple operating points.

2. FUNDAMENTALS

The proposed algorithm generates a ranking of the parameters according to their identifiability, measured through the magnitude of their effects on the output variables and a linear-independence metric. The magnitude of the effects of the parameters and the linear-independence metric are calculated from the sensitivity matrix, as proposed by Li *et al.* (2004).

Additionally, a predictability degradation index and a parameter correlation degradation index are defined to be used as stop criteria for the parameter selection algorithm, addressing the question of the number of parameters that should be estimated. The use of the predictability degradation index accounts for the fact the variability of the prediction is expected to increase when the optimum number of selected parameters is overcome. The use of the parameter correlation degradation index is intended to avoid the selection of an unnecessarily high number of parameters, which would increase the correlation between the parameters.

Another important feature in the proposed algorithm is the usage of global sensitivity matrix, which is composed by the information at each experimental point. In this way, the local calculations proposed by Li *et al.* (2004) for the magnitude of the effects of the parameters and the linear-independence metric was easily extended to deal with multiple operating points and dynamic data.

Li *et al.* (2004) have proposed a different dynamic extension procedure, based on a sensitivity matrix to be obtained as the weighted average of the local sensitivity matrices. Although the authors have not implemented this procedure and, consequently, there are not results to be used as basis of comparison, the usage of the global sensitivity matrix is expected to be a more reliable approach. The reason for this statement is that an average sensitivity matrix could lead to loss of information, mainly in problems where the sign of the gains are expected to change.

The definition of the degradation indexes for predictability and parameter correlation as well as the procedure to the calculation of the sensitivity matrix are presented in the next section.

3. AUTOMATIC PARAMETER SELECTION AND ESTIMATION ALGORITHM

The proposed algorithm for automatic selection of model parameters with simultaneous parameter estimation is based on an extension of the identifiability measure of Li *et al.* (2004) and on the proposed predictability degradation index.

For a given set $\{y \in \mathfrak{R}^{ny}, u \in \mathfrak{R}^{nu}\}$ of N experiments (or available process data in N steady-state operating conditions or N dynamic time-points) with r repetitions and a given nonlinear model of the process, the following algorithm is applied to estimate the best possible parameters within a set of $\theta \in \mathfrak{R}^{np}$.

Algorithm SELEST:

1) Evaluate the mean values of y and u for each experiment:

$$\bar{y} = \frac{1}{r} \sum_{k=1}^r y_k \in \mathfrak{R}^{ny \cdot N} \quad \text{and} \quad \bar{u} = \frac{1}{r} \sum_{k=1}^r u_k \in \mathfrak{R}^{nu \cdot N} \quad (1)$$

and, if not given, compute the normalized measurement covariance matrix ($V_y \in \mathfrak{R}^{ny \cdot N \times ny \cdot N}$):

$$V_y = \frac{(y - \bar{y} \cdot \mathbf{1}_{1,r})(y - \bar{y} \cdot \mathbf{1}_{1,r})^T}{r-1} \otimes^{-1} \bar{y}\bar{y}^T \quad (2)$$

where \otimes^{-1} denotes element-by-element division, $\mathbf{1}_{1,r}$ denotes a row vector of ones, and $y \in \mathfrak{R}^{ny \cdot N \times r}$.

2) Compute the normalized parameter-output sensitivity matrix, $S \in \mathfrak{R}^{ny \cdot N \times np}$, using an initial estimate of the model parameters, θ_o :

$$S = [S_1^T \ S_2^T \ \dots \ S_N^T]^T \quad (3)$$

where $S_j = (\hat{\partial} \hat{y}_j)^{-1} \hat{S}_j \diamond \theta_o \in \mathfrak{R}^{ny \times np}$, $\hat{\partial}(\cdot)$ denotes the diagonal matrix of a vector, $\hat{y}_j \in \mathfrak{R}^{ny}$ is the model prediction for the j -th experimental point, using the input mean value \bar{u}_j :

$$\begin{aligned} F(t_j, x, \dot{x}, \bar{u}_j; \theta_o) &= 0 \quad , \quad x(0) = \bar{x}_o \\ \hat{y}_j &= H(x, \bar{u}_j; \theta_o) \end{aligned} \quad (4)$$

and \hat{S}_j is the parameter-output sensitivity matrix evaluated at the j -th point:

$$\hat{S}_j = \frac{\partial H}{\partial x} W_x + \frac{\partial H}{\partial \theta} \quad (5)$$

The parameter-state sensitivity matrix, $W_x = \frac{\partial x}{\partial \theta}$, is obtained by solving the following initial-value problem for dynamic processes:

$$\frac{\partial F}{\partial \dot{x}} \dot{W}_x + \frac{\partial F}{\partial x} W_x + \frac{\partial F}{\partial \theta} = 0 \quad , \quad W_x(0) = \frac{\partial x_o}{\partial \theta} \quad (6)$$

or the linear system:

$$W_x = - \left(\frac{\partial F}{\partial x} \right)^{-1} \frac{\partial F}{\partial \theta} \quad (7)$$

for steady-state processes.

3) Set $m = \min \{np, n_y \cdot N\}$ and carry out the singular values decomposition of S left-weighted by the inverse of the normalized standard deviation of the measurements, $\sigma_i = \sqrt{(V_y)_{ii}}$:

$$(\diamond\sigma)^{-1} S = U \Sigma V^T \quad (8)$$

or, similarly, carry out the descending-ordered characteristic values decomposition of the Fisher information matrix:

$$F = S^T (\diamond V_y)^{-1} S = V \Lambda V^T, \quad \Lambda = \Sigma^T \Sigma \quad (9)$$

where $\diamond V_y$ denotes the diagonal matrix composed by the elements of the diagonal of V_y . Then, determine the overall effect of each parameter on the outputs by using the first m principal components (first m column vectors of matrix V , denoted by $V_m \in \mathfrak{R}^{np \times m}$) and the magnitude measure E (Li *et al.*, 2004):

$$E = \frac{|V_m| \lambda}{\sum_{j=1}^m \lambda_j} \in \mathfrak{R}^{np} \quad (10)$$

where $|V_m|$ denotes the matrix with absolute value of the elements of V_m , and λ are the first largest m characteristic values in Λ .

4) Select the highest ranked parameter $p_1 = \{\theta_k \mid E_k = \max_j E_j\}$ and set the number of selected parameters to $n = 1$ and the parameter index set to $\Omega_n = \{k\}$, representing the index set of the best possible parameters to be estimated with the given data set (in descending order).

5) Compute the reduced Fisher information matrix, F_n , regarding to the selected parameters p and the corresponding covariance matrices estimates of the parameters, V_p , and output predictions, $V_{\hat{y}}$:

$$F_n = S_{\Omega}^T (\diamond V_y)^{-1} S_{\Omega} \in \mathfrak{R}^{n_y \times n} \quad (11)$$

$$V_p = F_n^{-1} \quad (12)$$

$$V_{\hat{y}} = S_{\Omega} V_p S_{\Omega}^T \quad (13)$$

where S_{Ω} denotes the sub-matrix of S containing only the Ω_n columns. Also, compute the correlation coefficients of these covariance matrices, ρ_p and $\rho_{\hat{y}}$, and the condition number, κ , of F_p :

$$\rho_p = V_p \otimes^{-1} \sqrt{\diamond V_p \diamond V_p^T}, \quad \bar{\rho}_p = \| \rho_p - I_n \|_{\infty} \quad (14)$$

$$\rho_{\hat{y}} = V_{\hat{y}} \otimes^{-1} \sqrt{\diamond V_{\hat{y}} \diamond V_{\hat{y}}^T}, \quad \bar{\rho}_{\hat{y}} = \| \rho_{\hat{y}} - I_{n_y} \|_{\infty} \quad (15)$$

$$\kappa = \|F_n\| \cdot \|V_p\| \quad (16)$$

where I_n denotes the identity matrix of size n , and $\|\cdot\|_{\infty}$ denotes the highest element of a matrix in

absolute value. With this norm definition, $\bar{\rho}_p$ gives the highest correlation among the parameters.

6) Keeping the remaining parameters at the initial estimate θ_o , obtain a new estimate vector \hat{p}_n for the parameters p by least square (or maximum likelihood) parameter estimation for the selected parameters. Also compute the normalized residuals ξ , the predictability degradation index ψ_n , and the parameter correlation degradation index η_n

$$\xi = \frac{1}{r} \sum_{k=1}^r [y_k - \hat{y}_k(\hat{p}_n)] \otimes^{-1} y_k \in \mathfrak{R}^{n_y \times N} \quad (17)$$

$$\psi_n = \bar{\rho}_{\hat{y}} + \|\xi\|_{\infty} \quad (18)$$

$$\eta_n = \bar{\rho}_p + \delta_{1,n} \quad (19)$$

where $\delta_{i,j}$ is the Kronecker delta. The addition of $\delta_{1,n}$ in Eqn. (19) is necessary to avoid an early stop in step 7 when $n = 2$.

7) Apply the following stop criteria, using a maximum allowed parameter correlation, ρ_{\max} :

7.a) If $n > 1$ and ((($\psi_{n-1} < 1$ or ($\eta_{n-1} < \rho_{\max}$ and $\eta_n > \rho_{\max}$)) and $\psi_{n-1} < \psi_n$) or $\kappa^{-1} < \varepsilon$), then Ω_{n-1} is the solution index set and \hat{p}_{n-1} is the corresponding estimated parameter vector, and terminate the algorithm. ε is the floating-point relative accuracy of the machine.

7.b) If $n = np$, then Ω_n is the solution index set and \hat{p}_n is the corresponding estimated parameter vector, and terminate the algorithm.

8) If $n < m$, then compute the linear-independence metric d_j (Li *et al.*, 2004) for each remaining parameter with respect to previously selected parameters:

$$d_j = \sin \left[\cos^{-1} \left(\frac{s_j^T V_{\Omega} s_j}{\|s_j\| \cdot \|V_{\Omega} s_j\|} \right) \right], \quad \forall j \notin \Omega_n \quad (20)$$

where $V_{\Omega} = S_{\Omega} (S_{\Omega}^T S_{\Omega})^{-1} S_{\Omega}^T$. Otherwise, i.e. $n \geq m$, compute the linear-independence metric $d_{q,j}$ for each remaining parameter with respect to all possible $(m-1)$ -tuples Ω_q of the previously selected parameters, for

$$1 \leq q \leq \frac{n!}{(m-1)!(n-m+1)!}, \quad (21)$$

where $\Omega_q \subset \Omega_n$ and $|\Omega_q| = m-1$, using Eqn. (22).

$$d_{q,j} = \sin \left[\cos^{-1} \left(\frac{s_j^T V_{\Omega_q} s_j}{\|s_j\| \cdot \|V_{\Omega_q} s_j\|} \right) \right], \quad \forall j \notin \Omega_n \quad (22)$$

where $V_{\Omega_q} = S_{\Omega_q} (S_{\Omega_q}^T S_{\Omega_q})^{-1} S_{\Omega_q}^T$. And determine the worst-case metric: $d_j = \min_q d_{q,j}$.

9) Calculate the identifiability index I_j (Li *et al.*, 2004) for each remaining parameter θ_j :

$$I_j = E_j d_j, \quad \forall j \notin \Omega_n. \quad (23)$$

Select the next highest ranked parameter $p_{n+1} = \{\theta_k \mid I_k = \max_j I_j\}$, set the number of selected parameters to $n = n + 1$ and the index set to $\Omega_n = \{\Omega_{n-1}, k\}$, and return to step 5.

It is also possible to add the following diagnostic information in the exit conditions of step 7, evaluated at the stage $n-1$ (7.a) or n (7.b):

If $\bar{\rho}_{\hat{y}} \geq \rho_{\max}$ and $\bar{\rho}_p < \rho_{\max}$ then the outputs are too much correlated due to possibly high inputs correlation;

If $\bar{\rho}_{\hat{y}} \geq \rho_{\max}$ and $\bar{\rho}_p \geq \rho_{\max}$ then the outputs are too much correlated due to high parameter correlation;

If $\bar{\rho}_p \geq \rho_{\max}$ then the parameters are too much correlated.

The design constant ρ_{\max} of the algorithm is an upper bound for the degree of parameter correlations. This limit is much easier to set than a threshold for the identifiability index I_j , whose value depends much more on experiments than statistic meanings.

4. ILLUSTRATIVE EXAMPLES

In order to illustrate the application of the algorithm SELEST, consider the following hypothetical nonlinear input-output model:

$$\begin{aligned} y_1 &= \theta_1 e^{-\theta_2/u_1} u_2 u_3 + \theta_3 e^{-\theta_4/u_1} u_2 u_4 \\ y_2 &= 1 - \theta_1 e^{-\theta_2/u_1} u_2 u_3 + \theta_5 e^{-\theta_6/u_1} u_3 \\ y_3 &= \theta_7 u_1 + \theta_8 (\theta_1 e^{-\theta_2/u_1} u_2 u_3 + \theta_5 e^{-\theta_6/u_1} u_3) \end{aligned} \quad (24)$$

with $y \in \mathfrak{R}^3$, $u \in \mathfrak{R}^4$, and $\theta \in \mathfrak{R}^{8+}$. The limited experimental data is composed by $N = 3$ operating points (OP) and $r = 3$ repetitions, shown in Table 1 for three cases. The initial estimate of the model parameters and their exact solution are given in Table 2. The repetitions were generated considering no errors in the inputs, using the exact parameters and adding to the outputs a noise with normal distribution, zero mean, and variance of 5% within 98% of significance level.

In the case 1, the most important input variable, u_1 , is kept constant, reducing the estimation capability of the measurements. In the case 3, the last two OPs are correlated. The case 2 is the most favourable data set among the three cases.

Table 1. Experimental data sets for example 1.

var.	OP ₁	OP ₂	OP ₃	
case 1	u_1	0.98	0.98	0.98
	u_2	0.73	0.13	0.43
	u_3	0.23	0.45	0.72
	u_4	0.67	0.47	0.13
	y_1	0.676/0.700/0.710	0.178/0.174/1.175	0.758/0.765/0.762
	y_2	0.623/0.621/0.614	0.933/0.919/0.911	0.332/0.338/0.341
	y_3	7.810/7.508/7.383	6.959/6.903/6.871	9.093/8.889/9.348
case 2	u_1	0.98	0.52	0.75
	u_2	0.73	0.13	0.43
	u_3	0.23	0.45	0.72
	u_4	0.67	0.47	0.13
	y_1	0.676/0.700/0.710	0.058/0.058/0.059	0.537/0.517/0.536
	y_2	0.623/0.621/0.614	0.954/0.969/0.975	0.527/0.545/0.539
	y_3	7.810/7.508/7.383	3.417/3.655/3.532	6.573/6.800/6.761
case 3	u_1	0.98	0.52	0.52
	u_2	0.73	0.13	0.13
	u_3	0.23	0.45	0.45
	u_4	0.67	0.47	0.57
	y_1	0.676/0.700/0.710	0.058/0.058/0.059	0.059/0.059/0.058
	y_2	0.623/0.621/0.614	0.954/0.969/0.975	0.988/0.984/1.002
	y_3	7.810/7.508/7.383	3.417/3.655/3.532	3.489/3.507/3.494

Observing the maximum normalized residuals in Table 2, the reduced-space parameter estimation had similar performance than the full space, showing that the additional parameters would have insignificant improvement in the model predictions. In fact, the index ψ shows the degradation of the predictability for the case 1 when adding the next parameter given by the identifiability index, and a very small improvement in the case 3. In both cases, according to η , the next parameter is highly correlated with the previous selected parameters (ρ_{\max} was set to 0.99). Moreover, the full-space estimations were more sensitive to the initial estimates. The high residuals for the exact parameters are due to the random nature of the noise added to the outputs.

Table 2. Model parameters estimates for example 1. Bold results mean the estimates of the selected parameters in the order shown between parentheses.

par.	exact	θ_o	case 1	case 2	case 3
θ_1	7.65	6.50	6.50	7.429(5)	7.551(5)
θ_2	1.15	2.40	0.988(1)	1.130(2)	1.133(3)
θ_3	3.89	2.70	2.70	3.161(3)	3.558(4)
θ_4	1.75	1.50	1.465(2)	1.603(1)	1.739(2)
θ_5	0.23	0.01	0.116(5)	0.136(7)	0.086(7)
θ_6	0.79	0.15	0.15	0.586(8)	0.15
θ_7	6.32	4.25	6.434(3)	6.400(4)	6.461(1)
θ_8	3.42	5.50	3.651(4)	3.608(6)	3.084(6)
$\ \xi\ _\infty$	final estimate		0.0259	0.0172	0.0136
	exact		0.0447	0.0330	0.0306
	initial estimate		1.4702	0.8066	0.7774
	full estimate*		0.0261	0.0170	0.0130
Ψ	n		1.0206	0.6435	1.0136
	$n+1$		1.0225	-----	1.0130
η	n		0.7027	0.9983	0.9697
	$n+1$		1.0000	-----	1.0000

*estimating all np parameters using the exact solution as initial guess.

Applying the diagnostic conditions at exit of step 7 of the algorithm SELEST, the results for the cases 1 and 3 say the outputs are too much correlated due to possibly high inputs correlation, and the parameters are too much correlated in the case 2. Indeed, case 3 was designed with high input correlation in OP_1 and OP_2 and in case 1 all operating points are correlated by the input variable u_1 . In case 2, the correlation between θ_1 and θ_2 was the responsible for the high degradation index η_n .

The model parameters were estimated by the least square technique using the Levenberg-Marquardt method with the BFGS (Broyden, Fletcher, Goldfarb, and Shanno) updating scheme for the Hessian matrix (Edgar and Himmelblau, 1988) and relative error tolerance of 10^{-6} for variables and objective function.

Consider now a real example of a multi-route, non-structured kinetic model for microbial growth and substrate consumption of an experimental isothermal batch bioreactor to produce β -galactosidase by *Kluyveromyces marxianus* growing on cheese whey (Longhi *et al.*, 2004). The model is described by a set of five ordinary differential equations:

$$F(t, x, \dot{x}, u; \theta) = \dot{x} - f(t, x, u; \theta) = 0 \quad , \quad x(0) = x_o \quad (25)$$

$$y = H(x, u; \theta)$$

where the states $x \in \mathfrak{R}^5$ are biomass, lactose, ethanol, liquid-phase and gas-phase oxygen concentrations, $u \in \mathfrak{R}$ is the reactor temperature, and $y \in \mathfrak{R}^4$ are x_1 , x_2 , x_3 , and oxygen saturation percentage (pO_2), which is a function of x_4 and u (Longhi *et al.*, 2004). Only one operating condition was used to test the algorithm, at $u = 38^\circ\text{C}$. The experimental data set is shown in Table 3, and the initial conditions for the state variables are $\{0.16, 48.90, 0, 0.0075, 1.152\}$. The model has 12 parameters and their initial estimates are given in Table 4.

Table 3. Experimental data for example 2.

time (h)	y_1 (g/L)	y_2 (g/L)	y_3 (g/L)	y_4 (%)
0	0.16	48.90	0.000	102.5
2	0.19	51.14	0.263	95.5
4	0.30	47.35	0.149	81.9
6	1.68	46.43	0.215	25.5
8	6.59	33.00	2.126	0.8
10	13.09	9.86	11.057	0.2
15	20.42	0.30	6.750	0.1
24	22.74	0.00	0.000	91.2
27	23.11	0.00	0.000	100.6
30	22.65	0.00	0.000	102.9

As shown in Table 4, the tuning of the first ten parameters ranked by the identifiability index got the best predictive capacity from the limited available experimental data. This is also proved in Figure 1, when comparing the prediction of the models adjusted by reduced-space and full-space parameter estimations with the experimental data. The most pronounced difference between the models appears in the dissolved oxygen and ethanol concentrations. In this example ρ_{\max} was set to 0.98 and the system of ordinary differential equations was integrated by

an implicit BDF method of variable order (Brenan *et al.*, 1989) with relative error tolerance of 10^{-6} and absolute error tolerance of 10^{-8} .

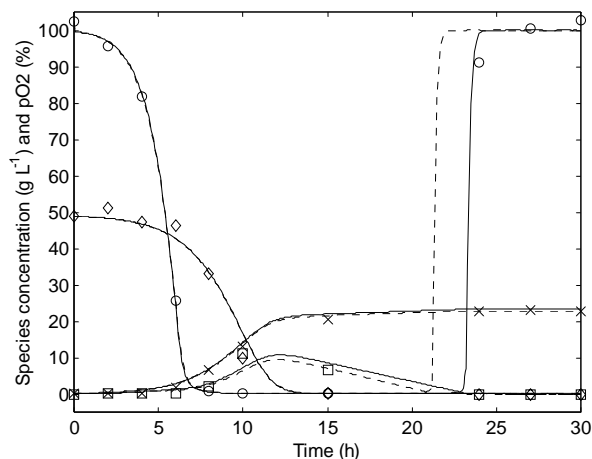


Fig. 1. Experimental data (symbols) for batch culture at 38°C : (x) biomass concentration (y_1), (\diamond) substrate concentration (y_2), (\square) ethanol concentration (y_3), and (o) dissolved oxygen concentration (y_4); and model predictions with reduced-space (solid line) and full-space (dotted line) parameter estimations.

Table 4. Model parameters estimates for example 2. Bold results mean the estimates of the selected parameters in the order shown between parentheses.

parameters*	θ_o	\hat{p}	\hat{p} full
$\theta_1 = \mu_{1\max}$	0.60	0.600(2)	0.600
$\theta_2 = \mu_{2\max}$	0.06	0.06	0.054
$\theta_3 = \mu_{3\max}$	0.16	0.190(10)	0.206
$\theta_4 = k_1$	20.00	20.00(4)	19.953
$\theta_5 = k_{ox1}$	1.00	1.001(1)	1.032
$\theta_6 = k_2$	4.26	4.419(3)	4.183
$\theta_7 = \phi_{X/S}^{oxid} / Y_{X/S}^{oxid}$	0.63	0.63	0.676
$\theta_8 = \phi_{X/E}^{oxid} / Y_{X/E}^{oxid}$	6.20	6.257(7)	6.206
$\theta_9 = 1/Y_{X/S}^{ferm}$	2.44	2.411(5)	2.466
$\theta_{10} = 1/Y_{X/S}^{oxid}$	2.63	2.480(9)	2.664
$\theta_{11} = \phi_{X/S}^{ferm} / Y_{X/S}^{ferm}$	0.85	0.935(6)	0.914
$\theta_{12} = 1/Y_{X/E}^{oxid}$	6.67	6.257(8)	6.669
$\ \xi\ _\infty$	0.1199	0.0787	0.0880
ψ	n	1.0787	1.0880
	$n+1$	1.0880	-----
η	n	0.9209	0.9860
	$n+1$	0.9867	-----

* See (Longhi *et al.*, 2004) for parameters definitions.

5. CONCLUSION

An algorithm for automatic selection and estimation of model parameters, based on the identifiability index of Li *et al.* (2004), has been proposed. The predictability and parameter correlation degradation indexes presented good performance as criteria for the determination of the number of parameters that

should be estimated. The usage of the global sensitivity matrix showed to be an adequate strategy to analyze the parameters effects on the outputs when dealing with multiple operating points or dynamic data. The employed examples showed that the algorithm was effective for estimating the best possible subset of parameters within a full set of model parameters, both for steady-state and dynamic models.

REFERENCES

- Brenan, K, S. Campbell and L. Petzold (1989). *Numerical solution of initial-value problems in differential-algebraic equations*. Elsevier, New York.
- Brun, R., M. Kühni, H. Siegrist, W. Gujer and P. Reichert (2002). Practical identifiability of ASM2d parameters—systematic selection and tuning of parameter subsets. *Water Res.*, **36**, 4113-4127.
- Calvello, M. and R. J. Finno (2004). Selecting parameters to optimize in model calibration by inverse analysis. *Comp. & Geotech.*, **31**, 411–425.
- Edgar, T.F. and D.M. Himmelblau (1988). *Optimization of Chemical Processes*. McGraw-Hill, New York.
- Ioslovich, I., P.-O. Gutman and I. Seginer (2004). Dominant parameter selection in the marginally identifiable case. *Math. Comp. in Simul.*, **65**, 127–136.
- Li, R., M.A. Henson and M.J. Kurtz (2004). Selection of Model Parameters for Off-Line Parameter Estimation. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, **12** (3) 402-412.
- Longhi, L.G.S., D.J. Luvizetto, L.S. Ferreira, R. Rech, M.A.Z. Ayub and A.R. Secchi (2004). A Growth Kinetic Model of *Kluyveromyces marxianus* Cultures on Cheese Whey as Substrate. *Journal of Industrial Microbiology*, **31** (1) 35–40.
- Weijers, S.R. and P.A. Vanrolleghem (1997). A procedure for selecting best identifiable parameters in calibrating activated sludge model no.1 to full-scale plant data. *Water Sci. Technol.*, **36**, 69-79.