OBSERVADORES (“SOFTWARE SENSORS”)

Son algoritmos construidos a partir de un modelo dinámico del proceso que nos permiten estimar en línea variables no medidas (típicamente concentraciones) y/o parámetros no conocidos (cinéticos o estequiométricos) a partir de las medidas que se puedan realizar en línea.

Observadores clásicos - Sea el siguiente modelo

$$\frac{dx}{dt} = f(x,u)$$
$$y = h(x)$$

La estructura general de un observador de estado es

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = f(\hat{x},u) + K(\hat{x})(y-\hat{y})$$
$$\hat{y} = h(\hat{x})$$

Donde K es la “ganancia” del observador. Se trata de elegir la K adecuada.

1

Originalmente se desarrollaron para sistemas lineales. Por eso para los sistemas no lineales se hace una “extensión” del mismo concepto y se habla de observadores “extendidos”. Definamos el error de observación según

$$e = x - \hat{x}$$

cuya dinámica será

$$\frac{de}{dt} = f(\hat{x}+e,u) - f(\hat{x},u) - K(\hat{x})[h(\hat{x}+e) - h(\hat{x})]$$

Si consideramos la linealización en torno al error de observación $e = 0$

$$\frac{de}{dt} = [A(\hat{x}) - K(\hat{x})C(\hat{x})]e$$

dond
e

$$A(\hat{x}) = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_i}\right]_{x=\hat{x}} \qquad C(\hat{x}) = \left[\frac{\partial h_i}{\partial x_i}\right]_{x=\hat{x}}$$

El diseño consiste en seleccionar una matriz K que haga que la dinámica del error tenga ciertas propiedades deseadas.

2

Extended Luenberger Observer (ELO) - Se trata de que la dinámica del error sea asintóticamente estable (o sea, el error converja a cero).

Esto se logra si la matriz que multiplica el error y su derivada están acotadas:

$$\left\| A(\hat{x}) - K(\hat{x})C(\hat{x}) \right\| \leq C_1 \qquad \forall \hat{x}$$

$$\left\| \frac{d}{dt}\left[A(\hat{x}) - K(\hat{x})C(\hat{x}) \right] \right\| \leq C_2 \qquad \forall \hat{x}$$

y los valores propios tengan parte real negativa

$$\mathrm{Re}\{\lambda_i [A(\hat{x}) - K(\hat{x})C(\hat{x})]\} \leq C_3 < 0 \qquad \forall \hat{x},\ \forall i$$

3

Extended Kalman Observer – Se trata de elegir la matriz de ganancia K de modo que minimice el valor medio del cuadrado de los errores de observación:

$$E = \int_0^t e^T W e \, d\tau$$

donde W es la matríz que pondera los errores (por ejemplo cuando hay que normalizar los errores porque tienen distintas dimensiones.

Se puede demostrar que la matriz K tiene que ser igual a

$$K(\hat{x}) = R(\hat{x})C^T$$

Donde R es una matriz simétrica de NxN que es solución de la ecuación de Ricatti:

$$\frac{dR}{dt} = -RC^T WCR + RA^T(\hat{x}) - A(\hat{x})R, \quad R = R^T, \qquad R(0) = R_0 = R_0{}^T$$

4

Observadores Asintóticos – Permiten hacer estimaciones sin conocer las velocidades de reacción (aunque conociendo si la estequiometría).

$$\frac{dx}{dt} = -Dx + Kr(x) + F_{in} - Q(x)$$

Consideremos una partición del conjunto de variables de estado $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$

y del mismo modo las demás matrices, de modo que K_1 sea de rango completo.

$$\frac{dx_1}{dt} = -Dx_1 + K_1 r(x) + F_{in,1} - Q_1(x)$$
$$\frac{dx_2}{dt} = -Dx_2 + K_2 r(x) + F_{in,2} - Q_2(x)$$

Se define la transformación $z = x_2 - K_2 {K_1}^{-1} x_1$

$$\frac{dz}{dt} = \frac{dx_2}{dt} - K_2 K_1^{-1} \frac{dx_1}{dt} = -Dx_2 + K_2 r(x) + F_{in,2} - Q_2(x) - K_2 {K_1}^{-1}\left[-Dx_1 + K_1 r(x) + F_{in,1} - Q_1(x)\right]$$
$$= -D\left(x_2 - K_2 {K_1}^{-1} x_1\right) + F_2 - Q_2 + \left[K_2 r - K_2 {K_1}^{-1} K_1 r\right] - K_2 {K_1}^{-1}(F_1 - Q_1)$$

$$\frac{dz}{dt} = -Dz + F_2 - Q_2 - K_2 {K_1}^{-1}(F_1 - Q_1)$$

que es independiente de los términos cinéticos

5

Nuestro modelo

$$\frac{d\xi}{dt} = K\ r(\xi) - D\xi - Q + F$$

Consideremos un subconjunto de variables $x = [S_1\ S_2\ X_1\ X_2]$

y realizamos una partición: $x_1 = [S_1\ S_2]$ (variables medidas) y
$x_2 = [X_1\ X_2]$ (variables a estimar)

Las restantes matrices también se particionan en forma semejante:

$$K_1 = \begin{bmatrix} -k_1 & 0 \\ k_2 & -k_3 \end{bmatrix} \qquad K_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$ etc.

Entonces

$$\dot{x}_1 = K_1 r(x) - Dx_1 + F_1$$
$$\dot{x}_2 = K_2 r(x) - Dx_1$$

si K_1 es invertible

6

Se construye una matriz auxiliar

$$C = -K_2 K_1^{-1} = -\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{k_1} & 0 \\ \frac{k_2}{k_1 k_3} & -\frac{1}{k_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{k_1} & 0 \\ -\frac{k_2}{k_1 k_3} & \frac{1}{k_3} \end{bmatrix}$$

con la cual se define una nueva variable

$$z = x_2 - K_2 K_1^{-1} x_1 = x_2 + C x_1$$

$$\dot{z} = \dot{x}_2 + C\dot{x}_1 = -Dx_2 + C(-Dx_1 + F_1)$$

O sea

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1 + \frac{S_1}{k_1} \\ X_2 - \frac{k_2}{k_1 k_3} S_1 + \frac{S_2}{k_3} \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} \dot{z}_1 \\ \dot{z}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D\left(\frac{S_{1in} - S_1}{k_1} - X_1\right) \\ D\left(\frac{k_2}{k_1 k_3}(S_{1in} - S_1) + \frac{S_{2in} - S_2}{k_3} - X_2\right) \end{bmatrix}$$

que NO depende de la cinética. Puedo estimar las variables no medidas X_i *(si se conocen los coeficientes estequiométricos)*

Estimador basado en observadores

Expresamos nuestro sistema de la siguiente forma

$$\frac{dx}{dt} = F_1(x)\theta + F_2(x)$$

donde θ es el vector de parámetros cinéticos. Aplicando la misma partición

$$\frac{dx_1}{dt} = F_{11}(x)\theta + F_{21}(x)$$

Planteamos el siguiente observador

$$\frac{d\hat{x}_1}{dt} = F_{11}(x)\hat{\theta} + F_{21}(x) - \Omega(x_1 - \hat{x}_1)$$

$$\frac{d\hat{\theta}}{dt} = [F_{11}(x)]^T \Gamma(x_1 - \hat{x}_1)$$

Escribiremos $F_{11} = F_3(x)\, F_4(x)$ con F_4 una matriz diagonal y F_3 invertible. Se define una variable auxiliar

$$q = F_3^{-1} x$$

$$\frac{d\hat{q}}{dt} = F_4(x)\hat{\theta} + F_3^{-1} F_{21}(x) - \Omega(q - \hat{q})$$

$$\frac{d\hat{\theta}}{dt} = \Gamma(q - \hat{q})$$

Con esta transformación la ganancia del observador no depende de las variaciones de las variables

Se eligen $\Omega = \mathrm{diag}(-\omega_i)$, $\omega_i > 0$

$\Gamma = \mathrm{diag}(\gamma_i)$, $\gamma_i > 0$

y de acuerdo con Perrier *et al.* se pueden relacionar ambas matrices de modo que alcanza con fijar un parámetro por variable a determinar

$$\overline{\gamma_i} = \omega_i^{\,2}/4$$

Nuestro sistema:

$$q = \begin{bmatrix} -\frac{1}{k_1} & 0 \\ -\frac{k_2}{k_1 k_3} & -\frac{1}{k_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{k_1} S_1 \\ -\frac{k_2}{k_1 k_3} S_1 - \frac{1}{k_3} S_2 \end{bmatrix}$$

$$\frac{d\hat{q}_1}{dt} = \hat{\mu}_1 X_1 - D q_1 - D\frac{S_{1in}}{k_1} + \omega_1(q_1 - \hat{q}_1)$$

$$\frac{d\hat{\mu}_1}{dt} = \gamma_1(q_1 - \hat{q}_1)$$

$$\frac{d\hat{q}_2}{dt} = \hat{\mu}_2 X_2 - D q_2 - D\left(\frac{k_2}{k_1 k_3} S_{1in} + \frac{S_{2in}}{k_3}\right) + \omega_2(q_2 - \hat{q}_2)$$

$$\frac{d\hat{\mu}_2}{dt} = \gamma_2(q_2 - \hat{q}_2)$$

Para estimar coeficientes cinéticos