

OPTIMIZACIÓN DINÁMICA EN ECOSIMPRO®. APLICACIÓN A LA ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS Y VALIDACIÓN DE MODELOS

Elena Gómez

Centro de Tecnología Azucarera- Univ. de Valladolid, elenags@cta.uva.es

César de Prada

Dpto. Ingeniería de Sistemas y Automática - Univ. de Valladolid, prada@autom.uva.es

Resumen

Las técnicas de optimización dinámica se aplican para resolver problemas de gran interés: ajuste de los parámetros desconocidos de un modelo dinámico, validación de modelos, control predictivo basado en modelo. En el entorno del lenguaje de simulación EcosimPro®, se evaluó en primer lugar el funcionamiento de una herramienta de optimización y después se estudió de forma sistemática el problema de calibración y validación de modelos.

Palabras Clave: Optimización dinámica, estimación de parámetros, análisis de sensibilidad, identificabilidad, validación de modelos.

1 OPTIMIZACIÓN DINÁMICA

Son muchas las aplicaciones de la optimización en el campo de la ingeniería de procesos, cubriendo desde problemas de diseño a técnicas de control avanzado como el control predictivo (MBPC). En muchos casos, como ocurre a menudo en problemas de diseño, se trata de decisiones de tipo estático, donde las variables de decisión y el proceso considerado no evolucionan en el tiempo, sino que corresponden a una determinada situación de equilibrio. Por el contrario, en otros casos, las variables involucradas y el proceso evolucionan en el tiempo dando lugar a problemas de optimización dinámica.

En los problemas de optimización de sistemas dinámicos se desea optimizar una función objetivo $J(\mathbf{u}(t), \mathbf{x}(t))$ que es función de unas variables de decisión $\mathbf{u}(t)$ y de las variables de estado $\mathbf{x}(t)$ del proceso, que a su vez evolucionan en el tiempo. Las restricciones de un problema de optimización dinámica incluyen las ecuaciones diferenciales del modelo junto a otras como los límites inferior y superior de las variables de decisión, u otras particulares de cada problema. Cuando las variables

de decisión son de tipo real, los problemas resultantes se denominan de programación no-lineal dinámica.

Un problema general de este tipo con restricciones de igualdad y desigualdad se formula habitualmente del siguiente modo (1):

$$\begin{aligned} &\text{minimizar } J(\mathbf{u}, \mathbf{x}) && (1) \\ &\text{respecto a } \mathbf{u} \end{aligned}$$

sujeto a:

$$\begin{aligned} g_m(\mathbf{x}, \mathbf{u}) &\geq 0 && m = 1, 2, \dots, m \\ h_k(\mathbf{x}, \mathbf{u}) &= 0 && k = 1, 2, \dots, k \end{aligned}$$

$$\mathbf{u}_{inferior} \leq \mathbf{u} \leq \mathbf{u}_{superior}$$

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), t)$$

$$\hat{\mathbf{y}}(t) = \mathbf{g}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), t)$$

donde $\mathbf{x}(t)$ son los estados del sistema, $\hat{\mathbf{y}}(t)$ son las predicciones del modelo para las respuestas medibles del sistema y $\mathbf{u}(t)$ es un vector de variables de decisión que puede variar en función del tipo de problema considerado.

Hay varias técnicas posibles para su resolución que tratan de reformular el problema en términos de uno de programación no-lineal (NLP) y pueden clasificarse dentro de dos grandes familias: Los llamados métodos simultáneos, que reformulan la parte dinámica de las restricciones convirtiéndola en un conjunto de ecuaciones algebraicas, bien mediante métodos de colocación o fórmulas de integración numérica, y los llamados métodos sucesivos, que se basan en la integración de las ecuaciones dinámicas y serán los considerados en este trabajo.

Así pues, la función objetivo a minimizar se calculará para unos valores determinados de las variables de decisión mediante la simulación del modelo correspondiente desarrollado en EcosimPro®, que es el entorno de modelado empleado.

Las variables de decisión a optimizar y la función objetivo son distintas dependiendo del tipo de problema de optimización dinámica de que se trate.

En este trabajo se considerará un caso de estimación de parámetros de un modelo, el cual consiste en hallar los parámetros desconocidos de un modelo dinámico para que su respuesta se ajuste lo más posible a los datos experimentales del proceso real. Resulta de gran interés dado que por lo general siempre existen parámetros que no pueden conocerse previamente de forma sencilla (bibliografía, experimentación específica) y que necesitan ser estimados, de modo que las variables de decisión son los valores de los parámetros desconocidos de un modelo y la función objetivo mide la distancia entre las respuestas del modelo y unos datos experimentales.

1.1 OBJETIVOS

Para la estimación mediante optimización dinámica de los parámetros desconocidos y la validación, se empleó el modelo correspondiente a un proceso muy sencillo consistente en un depósito al que llega un flujo de entrada y del que sale un flujo por gravedad, que dispone de agitación y una resistencia eléctrica calefactora (Figura 1). Las hipótesis consideradas son las de mezcla perfecta, propiedades físicas constantes e inercia térmica del recipiente despreciable. El modelo se formula a partir de las ecuaciones diferenciales de los balances de materia y energía (2 y 3). Las salidas medidas se corresponden con los estados del sistema: nivel h , temperatura T . Los supuestos parámetros desconocidos θ a estimar son 4: k factor de fricción de la tubería de salida (θ_1), U_{amb} coeficiente de pérdida de calor al ambiente (θ_2), A superficie del depósito (θ_3), R resistencia eléctrica (θ_4). Las incertidumbres se supusieron de $\pm 25\%$.

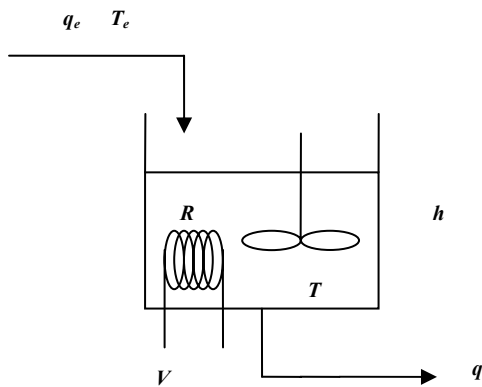


Figura 1: Esquema del modelo del depósito.

Siendo q_e y T_e el caudal y temperatura de la alimentación, ρ y Cp la densidad y el calor específico del líquido, T_{amb} la temperatura externa del ambiente y V la tensión aplicada a la resistencia eléctrica:

$$A \cdot \frac{dh}{dt} = q_e - k\sqrt{h} \quad (2)$$

$$A \cdot h \cdot \rho \cdot Cp \cdot \frac{dT}{dt} = q_e \cdot \rho \cdot Cp \cdot (T_e - T) + \frac{V^2}{R} - U_{amb} \cdot (T - T_{amb}) \quad (3)$$

Con el modelo del depósito se analizaron las distintas técnicas empleadas. Los supuestos datos reales del proceso se obtuvieron mediante simulación, incluyéndose en las señales ruido generado a partir de un modelo ARMA (auto-regresivo y de media móvil).

2 ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS

Antes de efectuar la estimación de parámetros mediante técnicas de optimización dinámica es necesario realizar un análisis para determinar cuáles de ellos es conveniente estimar. Para ello se utilizó un procedimiento sistemático, que en primer lugar analiza las sensibilidades del modelo respecto a los parámetros desconocidos para determinar cuáles son los más importantes, en segundo lugar evalúa la identificabilidad de distintos subconjuntos de parámetros (que incluyen aquellos importantes individualmente de acuerdo con la sensibilidad) y, por último, selecciona uno o varios subconjuntos de parámetros a estimar.

2.1 RESOLUCIÓN POR OPTIMIZACIÓN

El planteamiento y la forma de resolver un problema de estimación de parámetros en términos de optimización considera que para cada valor del vector de parámetros θ (variables de decisión) el modelo proporciona una predicción de la respuesta del sistema $\hat{y}(\theta)$ en un experimento determinado. Se toman muestras de los datos de entradas $u(t)$ y salidas $y(t)$ del sistema real sobre un período de tiempo $t = 1, \dots, N$. Al modelo se le aplica la misma secuencia de variables manipuladas $u(t)$ que al sistema. Para cada instante de tiempo t , el error de predicción $e(t)$ (4) es una medida de la bondad del modelo:

$$e(\theta, t) = \hat{y}(\theta, t) - y(t) \quad (4)$$

y se trata de encontrar los valores de los parámetros θ que minimizan los errores de predicción a lo largo de un experimento. Esto se puede formular como un problema de optimización según (5):

$$\min_{\theta} J = \sum_i \sum_{t=1}^N \gamma_i [e_i(t)]^2 = \sum_i \sum_{t=1}^N \gamma_i \cdot [\hat{y}_i(\mathbf{u}, \theta, t) - y_i(t)]^2 \quad (5)$$

sujeto a las restricciones (6) y (7):

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \theta, t) \quad (6)$$

$$\hat{\mathbf{y}}(t) = \mathbf{g}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \theta, t)$$

$$\theta_{inferior} \leq \theta \leq \theta_{superior} \quad (7)$$

donde J es la función objetivo que evalúa el ajuste del modelo a los datos experimentales reales para el vector de parámetros θ , y el sumatorio se extiende a los instantes de tiempo muestreados t y a cada una de las salidas medidas i del sistema. Aunque el problema es multiobjetivo, lo mejor suele ser ajustar conjuntamente todas las salidas medidas. Los factores de peso γ_i permiten ponderar de forma distinta el ajuste en función de la precisión que se quiera en cada salida; sirven además para normalizar las salidas y que sean homogéneas.

Así pues, la función objetivo se formula a partir de un criterio de mínimos cuadrados ponderados. Los pesos γ_i suelen tomarse como los inversos de la varianza del ruido de las salidas medidas $\gamma_i = 1/\sigma_i^2$. De este modo se consigue que los subtotaes J_i de la función objetivo correspondientes a cada salida i tengan valores comparables en el óptimo, y por tanto que todas las salidas tengan la misma importancia relativa en el ajuste.

En una formulación (8) equivalente a (5):

$$\min_{\theta} J = \sum_{t=1}^N [\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{u}, \theta, t) - \mathbf{y}(t)]^T \cdot \mathbf{Q} \cdot [\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{u}, \theta, t) - \mathbf{y}(t)] \quad (8)$$

donde \mathbf{Q} es una matriz diagonal de pesos, igual a la inversa de la matriz de covarianzas del ruido de las medidas según lo indicado anteriormente.

El ruido de medida o debido a perturbaciones aleatorias puede caracterizarse con datos de las salidas de un experimento manteniendo las variables manipuladas constantes. La varianza del ruido del proceso para la salida i se estima según (9), donde \bar{y}_i es el valor medio de la salida i :

$$\sigma_i^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{t=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2 \quad (9)$$

Por último se introducirá la Matriz de Información de Fisher (FIM), dado que se utilizará posteriormente. La FIM mide las sensibilidades del modelo respecto del vector de parámetros y se define según (10):

$$\text{FIM} = \left[\sum_{t=1}^N \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{y}}(t)}{\partial \theta} \right)^T \cdot \mathbf{Q} \cdot \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{y}}(t)}{\partial \theta} \right) \right] \quad (10)$$

Aunque no se aplicó en el presente trabajo, dicha matriz FIM es la base para el diseño óptimo de experimentos, dado que al maximizar la FIM –o alguna norma o función asociada– se maximiza la información extraída del sistema.

2.2 EXPERIMENTACIÓN

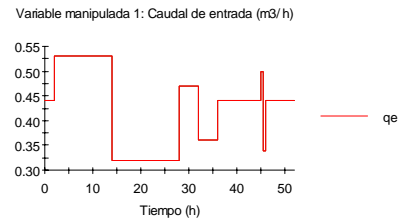


Figura 2: Secuencia de variable manipulada 1.

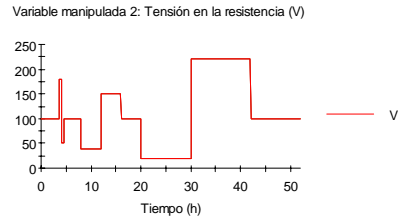


Figura 3: Secuencia de variable manipulada 2.

En la toma de datos experimentales del proceso real habrán de tomarse al menos dos conjuntos, uno para la calibración y otro para la validación del modelo. De acuerdo con las consideraciones habituales en experimentación, se eligió un período de muestreo adecuado; amplitud y frecuencia de las entradas convenientes para excitar las dinámicas fundamentales del sistema; se especificaron entradas no correlacionadas y condiciones de operación del proceso de interés. En las Figuras 2 y 3 puede verse un ejemplo de secuencia de entradas a aplicar al proceso.

2.3 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

Se consideraron dos sensibilidades diferentes (relativas para poder comparar), que dependen de la secuencia de variables manipuladas aplicada $\mathbf{u}(t)$ (es decir, del experimento) y del punto θ considerado en el espacio paramétrico:

a) Las de la función objetivo a minimizar respecto de los parámetros j . Por diferencias finitas según (11) será la forma de cálculo habitual:

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_j} \approx \theta_{j, inicial} \cdot \frac{J(\theta_j + \Delta\theta_j) - J(\theta_j)}{\Delta\theta_j} \quad (11)$$

aunque también pueden obtenerse analíticamente por integración numérica según (12):

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_j} = 2 \sum_i \sum_{t=1}^N \gamma_i [\hat{y}_i(\mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}, t) - y_i(t)] \frac{\partial \hat{y}_i(\mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}, t)}{\partial \theta_j} \quad (12)$$

donde las parciales de las respuestas del modelo respecto de cada parámetro $\partial \hat{y}_i / \partial \theta_j$ pueden obtenerse derivando respecto a $\boldsymbol{\theta}$ las ecuaciones del modelo (6) y teniendo en cuenta que $\partial \mathbf{u} / \partial \boldsymbol{\theta} = 0$ resulta (13):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\theta}} \right) &= \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\theta}} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \boldsymbol{\theta}} \\ \frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial \boldsymbol{\theta}} &= \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\theta}} + \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \boldsymbol{\theta}} \end{aligned} \quad (13)$$

siendo las incógnitas $\partial \mathbf{x} / \partial \boldsymbol{\theta}$. Integrando este sistema (13) de ecuaciones diferenciales junto a las ecuaciones del modelo (6), es posible obtener la evolución en el tiempo de $\partial \hat{\mathbf{y}} / \partial \boldsymbol{\theta}$ y por tanto las sensibilidades $\partial J / \partial \theta_j$ según (12).

b) Las sensibilidades de las respuestas del modelo (salidas) respecto de los parámetros según (14):

$$s_{ij} \approx \frac{\theta_{j, defecto}}{\bar{y}_i} \cdot \frac{\hat{y}_i(t, \theta_j + \Delta\theta_j) - \hat{y}_i(t)}{\Delta\theta_j} \quad (14)$$

Para obtener una medida cuantitativa de la importancia de cada parámetro individual j sobre cada salida i se utiliza el siguiente valor δ_{ij}^{msqr} – media cuadrática– integrado en el tiempo (15):

$$\delta_{i,j}^{msqr} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N s_{ij}^2(k)} \quad (15)$$

En las Figuras 4 y 5 se muestran respectivamente las dos salidas del sistema del depósito para cambios en uno solo de los parámetros según el experimento de las Figuras 2 y 3, lo que permite hacerse una primera idea gráfica de la sensibilidad.

En la Tabla 1 se muestran como ejemplo los valores numéricos de las sensibilidades de las dos salidas y la función objetivo J para los 4 parámetros desconocidos del depósito.

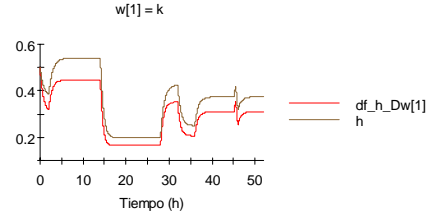


Figura 4: Sensibilidad de salida 1 vs. θ_1 .

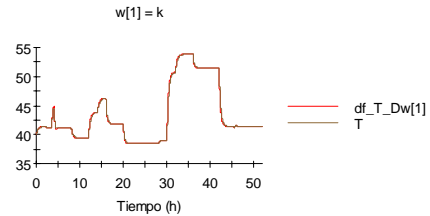


Figura 5: Sensibilidad de salida 2 vs. θ_1 .

Tabla 1: Sensibilidades respecto de los 4 parámetros a estimar en el modelo del depósito.

Parámetro	$\delta_{1,j}$	$\delta_{2,j}$	$\partial J / \partial \theta_j$
θ_1	1.54	0.04	344
θ_2	0	0.04	-7.3
θ_3	0.06	0.02	-1.1
θ_4	0	0.17	-34

En el análisis efectuado [6] se comprobó cómo ambas sensibilidades conducen en general a iguales conclusiones, aunque con ligeros matices ligados a las definiciones respectivas de las mismas. Las de las salidas $\delta_{i,j}^{msqr}$ apenas varían de $\theta_{inicial}$ a $\boldsymbol{\theta}^*$, pero no tienen en cuenta los pesos γ_i que ponderan las distintas salidas y que sí intervienen en la función objetivo a minimizar. Las de la función objetivo respecto de cada parámetro $\partial J / \partial \theta_j$ sí consideran los pesos que ponderan las distintas salidas i , pero presentan el inconveniente de depender demasiado de la posición relativa entre los datos experimentales y el modelo simulado para un $\boldsymbol{\theta}$ dado, por lo que pueden inducir a confusión cuando una salida se ajusta mucho mejor que otra u otras a los datos experimentales para un $\boldsymbol{\theta}$ en particular.

2.4 ANÁLISIS DE IDENTIFICABILIDAD

El orden de importancia de los parámetros obtenido a partir del análisis de las sensibilidades da una idea del efecto de cada parámetro –considerado individualmente– sobre las salidas. Sin embargo, es necesario estudiar también la influencia conjunta de los parámetros, pues puede ocurrir que el efecto sobre la salida provocado por un cambio en un parámetro se anule por un cambio en otro parámetro hecho simultáneamente. Se dice entonces que hay un

cierto grado de colinealidad en las sensibilidades de las salidas frente a los parámetros, lo que dificulta la identificación del conjunto de parámetros.

La identificabilidad es una propiedad estructural que depende de cómo los parámetros aparecen en el modelo, pero también de las medidas disponibles. Este aspecto puede mejorarse con un buen diseño de experimentos, pero a veces no puede hacerse nada. En cualquier caso, es bien sabido que la colinealidad no afecta negativamente a las predicciones del modelo, pero sí influirá en la precisión de la estimación –el valor más o menos exacto de los estimadores obtenidos–.

Se analizaron dos métodos para evaluar la identificabilidad de conjuntos de parámetros:

a) El método de Brun et al. (2002). Se basa en la dependencia lineal de subconjuntos de columnas de la matriz de sensibilidades S construida a partir de $\delta_{i,j}^{msqr}$. Brun define el índice de colinealidad (16):

$$\varphi_K = \frac{1}{\min_{\|\beta\|=1} \|\tilde{S}_K \beta\|} = \frac{1}{\sqrt{\lambda_K}} \quad (16)$$

donde \tilde{S}_K es una submatriz $n \times k$ de \tilde{S} que contiene las columnas correspondientes a los parámetros del subconjunto K , siendo n el número de salidas medidas y k el número de parámetros del subconjunto K ; \tilde{S} es la matriz de sensibilidades reescalada o normalizada, cuyas columnas se calculan según (17) y donde λ_K es el menor valor propio de $\tilde{S}_K^T \tilde{S}_K$.

$$\tilde{\delta}_j = \frac{\delta_j}{\|\delta_j\|} \quad (17)$$

b) El método de la matriz de información de Fisher (FIM). Como medida de la identificabilidad de los parámetros de un modelo con un experimento dado utiliza un índice de singularidad de matrices como el índice de condicionamiento, que se calcula como el cociente entre el máximo y el mínimo valor propio de la matriz FIM.

Valores altos de los índices de Brun o Fisher indican que las matrices son casi singulares, y por consiguiente el conjunto de parámetros θ no presentará una buena identificabilidad. El valor mínimo es 1 en ambos casos. En la Tabla 2 se muestran los resultados para algunos subconjuntos significativos del modelo del depósito.

Se comprobó [6] cómo ambos métodos, a pesar de proporcionar información análoga, pueden

complementarse en algunos casos particulares. El método de Brun puede conducir a colinealidades anormalmente elevadas de dos parámetros –a pesar de que éstos sean perfectamente identificables de acuerdo con el modelo– si los dos parámetros afectan de forma similar a las salidas (θ_2 θ_4). El método de Fisher por el contrario presenta la ventaja de permitir evaluar mejor la identificabilidad de acuerdo con el modelo y el experimento considerado; pero a su vez puede dar valores anormalmente altos de colinealidad cuando las sensibilidades relativas de los parámetros sean muy distintas en magnitud (θ_1 θ_2), al estar entonces la matriz FIM mal condicionada. De ahí que ambos métodos puedan ser utilizados de forma complementaria.

Tabla 2: Identificabilidad, modelo del depósito.

Subconjuntos parám.	Brun	Fisher
θ_1 θ_2 θ_3 θ_4	∞	1240
θ_1 θ_2	1.01	384
θ_1 θ_3	5.4	434
θ_1 θ_4	1.01	21
θ_2 θ_4	32000	59

Por último, se analizó [6] cómo las desviaciones típicas adimensionales σ_j calculadas a partir de la FIM pueden también utilizarse alternativamente para hallar una clasificación de los parámetros y seleccionar uno o varios subconjuntos a estimar, ya que los errores relativos de estimación (desviaciones típicas adimensionales usadas en el cálculo de regiones de confianza) que predice la FIM de forma aproximada para los parámetros dependen tanto de las sensibilidades individuales como de la identificabilidad dentro del conjunto.

2.5 ESTIMACIÓN POR OPTIMIZACIÓN

Se estimarán aquellos parámetros que presenten una sensibilidad elevada o considerable, nunca aquellos que presenten sensibilidades despreciables. Y en cuanto a la identificabilidad, interesa que el subconjunto de parámetros a estimar presente una baja colinealidad. Si la colinealidad es alta, habrá muchas combinaciones de valores θ^* que conducirán al mismo valor de J aproximadamente. No obstante, puede decidirse estimar un subconjunto de parámetros con elevada colinealidad, ya que normalmente estimar un número mayor de parámetros hace que el ajuste a los datos experimentales sea mejor. Aunque si el número de parámetros es considerable, lo lógico será seleccionar un conjunto con una buena identificabilidad para reducir el número de parámetros a estimar y facilitar así la tarea al algoritmo de optimización.

Tras seleccionar uno o varios subconjuntos de parámetros, la estimación se efectúa por optimización dinámica de acuerdo con una función multiobjetivo correspondiente a un criterio de mínimos cuadrados ponderados. Los datos experimentales no se filtraron dado que el ruido no afecta negativamente a la optimización y en modelos no lineales no está comprobado que conduzca a mejores estimas.

Tabla 3: Parámetros estimados e intervalos de confianza, cuando se estimaron 4 y 2 param.

Parám.	$\theta_{inicial}$	$\theta_{4 param}^*$	$\theta_{2 param}^*$
θ_1	0.72	(0.6195 \pm 0.0004)	(0.6195 \pm 0.0005)
θ_2	34	(52.4 \pm 1.2)	
θ_3	0.47	(0.465 \pm 0.007)	
θ_4	7.0	(9.69 \pm 0.11)	(11.08 \pm 0.09)

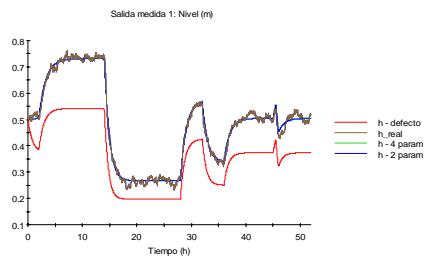


Figura 6: Salida medida 1.

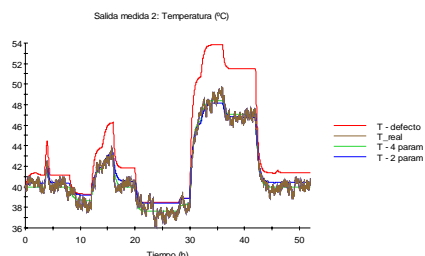


Figura 7: Salida medida 2.

En la Tabla 3 se muestran los estimadores (no escalados y con dimensiones) obtenidos cuando se estimaron 4 y 2 parámetros en el caso del depósito. Las Figuras 6 y 7 muestran la diferencia entre el ajuste del modelo a los datos experimentales antes y después de la estimación, cuando se seleccionaron subconjuntos de 4 y 2 (θ_1 θ_4) parámetros a estimar.

3 RESOLVEDORES EN EL ENTORNO ECOSIMPRO®

El entorno de modelado y simulación empleado EcosimPro® presenta muchas cualidades que le confieren una gran versatilidad y potencia.

Para la estimación de parámetros se analizó el funcionamiento de una herramienta general de optimización no lineal (NLP) a utilizar como resolvidor en problemas de optimización planteados en EcosimPro®, una rutina NAG® de minimización NLP que implementa un método de programación cuadrática secuencial SQP.

Dicho algoritmo utiliza un método determinista. Presenta la ventaja de la rapidez frente a un método heurístico, pero en general no garantiza que el óptimo hallado sea el global. Otras consideraciones generales a tener en cuenta cuando se trabaja en optimización son el necesario escalado de las variables de decisión, así como la importancia de inicializar y delimitar convenientemente las variables de decisión.

3.1 RUTINA DE LA LIBRERÍA NAG®

Para enlazar la rutina de optimización NAG® con EcosimPro® se empleó una llamada a la misma desde el experimento de EcosimPro®. Y se analizó la conveniencia de proporcionar a la rutina los gradientes analíticos de la función objetivo a optimizar respecto de las variables de decisión ($\partial J / \partial \theta$), gradientes obtenidos por integración numérica en EcosimPro® según (12).

El interés en analizar la conveniencia de proporcionar las derivadas analíticas integradas numéricamente – frente a la opción habitual de que sea el optimizador quien las estime como cociente de incrementos a partir de evaluaciones de la función objetivo– es debido a que uno de los puntos más críticos para la búsqueda del óptimo hace referencia al cálculo de las derivadas. Y es habitual en este tipo de problemas de optimización donde la función objetivo a minimizar se calcula tras una simulación que alrededor del 90% del tiempo de computación sea dedicado a la simulación del modelo (bien para obtener el valor de la función objetivo o sus gradientes), especialmente cuando el modelo tiene cierto grado de complejidad, por lo que es importante tratar de aumentar la eficiencia en la búsqueda de la solución.

Se evaluaron los resultados para distintas condiciones iniciales y límites en los parámetros, de acuerdo con la robustez (valor final alcanzado J^*), el número de iteraciones del algoritmo y el tiempo total de computación. Por otra parte, es sabido que la precisión del simulador ha de ser mayor que la precisión del resolvidor para que el algoritmo de optimización proporcione unos resultados fiables cuando la obtención de la función objetivo J involucra la resolución de sistemas de ecuaciones y simulación; un valor de dos órdenes de magnitud de diferencia suele ser suficiente. Por lo que igualmente se realizaron diferentes pruebas modificando

conjuntamente las precisiones de cálculo de la rutina de optimización NAG[®] y de EcosimPro[®].

La conclusión obtenida es que el óptimo encontrado cuando se proporcionan los gradientes analíticos a la rutina NAG[®] nunca supera ni en el valor hallado ni en el tiempo empleado al caso por defecto en que es la propia rutina quien evalúa esos gradientes por diferencias finitas. Puede por tanto extrapolarse a otros problemas de similares características y concluirse que no es conveniente proporcionar al optimizador los gradientes analíticos obtenidos por integración numérica en EcosimPro[®]; son costosos de calcular en tiempo y recursos y no conducen a una exactitud significativamente mayor en el óptimo alcanzado. Así pues, será más eficaz que la propia rutina NAG[®] de optimización los estime por diferencias finitas mediante evaluaciones de la función objetivo, perturbando las variables de decisión en la medida adecuada para que las derivadas sean suficientemente precisas.

4 VALIDACIÓN DE MODELOS

Tras la estimación de parámetros, la etapa posterior en el modelado de procesos es la validación del modelo resultante.

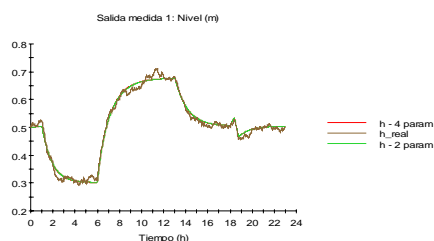


Figura 8: Validación, salida 1.

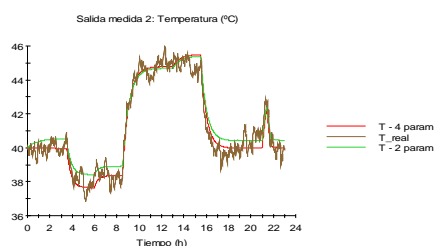


Figura 9: Validación, salida 2.

La validación es crítica dado que permite evaluar la credibilidad del modelo de acuerdo con el propósito determinado para el que se construye. La confianza en un modelo se obtiene a partir de resultados positivos en un conjunto de test. Si los resultados no fueran satisfactorios podría ser necesario repetir bien la estimación de parámetros –a partir de otros datos experimentales– o bien todo el proceso de establecimiento de hipótesis y formulación del

modelo. Se utilizaron distintas técnicas de validación del modelo propuesto, de acuerdo con un procedimiento sistemático [8], de las cuales, por problemas de espacio, sólo mencionamos la comparación con datos experimentales.

Para un experimento diferente al de parametrización, el modelo obtenido conduce a los resultados que se muestran en las Figuras 8 y 9. Se observa cómo el modelo estimando 4 parámetros permite un mejor ajuste que estimando 2 parámetros en la salida 2, pero la diferencia puede no ser significativa.

Agradecimientos

A Fernando Carbonero, de Empresarios Agrupados S.A., quien proporcionó valiosas referencias.

A ISA España, por todas las inestimables oportunidades que ofrece a los miembros de las Secciones de Estudiantes adscritas.

Referencias

- [1] Brun, R., et al., (2002) “Practical identifiability of ASM2d parameters- systematic selection and tuning of parameter subsets”, *Water Research* 36, pp. 4113-4127.
- [2] Chen, H., Kremling, Allgöwer, F., (1995) “Nonlinear predictive control of a benchmark CSTR”, *Proceedings of 3rd European Control Conference*, Roma.
- [3] Dueñas Díez, M., (2004) “Population balance modeling and passivity-based control of particulate processes, applied to the Silgrain[®] process”, Tesis Doctoral, Telemark University College.
- [4] Edgar, T., Himmelblau, D., Lasdon, L., (2001) “Optimization of chemical processes”, McGraw-Hill, Boston.
- [5] Empresarios Agrupados International, (2004) “EcosimPro Guides”, Madrid.
- [6] Gómez, E., (2006) “Optimización dinámica en EcosimPro[®]. Aplicación a la estimación de parámetros y optimización de un reactor”, Proyecto fin de carrera, Univ. de Valladolid.
- [7] Ljung, L., (1987) “System identification: theory for the user”, Prentice-Hall, New Jersey.
- [8] de Prada Moraga, C., (2004) “Validación de modelos”, Jornadas de Modelado y Simulación de procesos continuos organizadas por CEA-IFAC, Valladolid.