

ADAPTACIÓN AUTOMÁTICA DE SENSORES INFERENCIALES. UN ENFOQUE BAYESIANO

Emmanuel Sangoi^{a,b}, Carlos I. Sanseverinatti^a, Luis A. Clementi^{a,b} y Jorge R. Vega^{a,b}

^a *Grupo de Polímeros y Reactores de Polimerización, Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química, UNL-CONICET, Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina.
director-intec@santafe-conicet.gov.ar, www.intec.conicet.gov.ar*

^b *Centro de Investigación y Desarrollo en Ingeniería Eléctrica y Sistemas Energéticos (CIESE), Facultad Regional Santa Fe, Universidad Tecnológica Nacional, Lavaisse 610, 3000 Santa Fe, Argentina, ciese-direccion@frsf.utn.edu.ar, www.frsf.utn.edu.ar*

Palabras clave: Procesos Continuos, Monitoreo de Procesos, Sensores Inferenciales, Actualización de Bias, Inferencia Bayesiana, Cauchos Estireno-Butadieno

Resumen. Este trabajo propone una metodología basada en un enfoque estadístico Bayesiano para la adaptación automática de un sensor inferencial. A diferencia de los métodos clásicos, en esta propuesta se utiliza información estadística disponible (por ejemplo, el valor medio y el desvío estándar del error de predicción) para estimar el bias del sensor. La metodología propuesta se evaluó en base a simulaciones numéricas correspondientes al monitoreo en-línea de variables de calidad asociadas a un proceso continuo de síntesis de caucho estireno-butadieno. En particular, se estudió el desempeño del sensor inferencial en presencia de diferentes perturbaciones en las variables del proceso. Los resultados mostraron la eficiencia de la corrección Bayesiana del bias en comparación con las estrategias clásicas utilizadas.

Keywords: Continuous Processes, Process Monitoring, Inferential Sensors, Bias Adaptation, Bayesian Inference, Styrene-Butadiene Rubber

Abstract. This work proposes a Bayesian methodology for the automatic adaptation of an inferential sensor. Unlike classical methods, the proposed methodology utilizes available statistical information (e.g., the mean and variance of the prediction error), for estimating the bias. The proposed methodology was assessed on the basis of numerical simulations of the on-line monitoring of quality variables corresponding to a continuous process for the synthesis of a styrene-butadiene rubber. In particular, the sensor performance was studied in the presence of different perturbations in the process variables. The results showed the efficiency of the Bayesian correction of the bias in comparison to other classical strategies normally used.

1 INTRODUCCIÓN

Diversos procesos industriales requieren la medición en-línea de variables de proceso para control en lazo cerrado o el control de calidad de productos. Frecuentemente, dichas variables son de difícil determinación por el elevado costo o el excesivo tiempo de análisis de laboratorio. En consecuencia, esas variables sólo pueden medirse a intervalos de tiempo prolongados. En tales aplicaciones, se utiliza generalmente los denominados sensores inferenciales o computacionales, los cuales estiman o infieren la variable de interés a partir de variables de proceso medibles (Fortuna y col., 2007; King, 2017).

Un sensor inferencial es un modelo matemático que relaciona variables de entrada medibles con una o varias variables de salida. Los sensores inferenciales pueden desarrollarse sobre la base de primeros principios, es decir basados en ecuaciones de balance, leyes físicas y/o termodinámicas, etc., o pueden desarrollarse basados en datos, por ejemplo, mediante regresiones lineales, no lineales, redes neuronales, entre otros. En cualquier caso, dichos sensores solo exhiben un desempeño aceptable cuando se utilizan en condiciones cercanas a las existentes al momento de su calibración. En la industria de procesos, es usual incluir un término aditivo de bias en el sensor, para compensar aquellas perturbaciones introducidas por incertidumbres en las mediciones, cambios en las condiciones operativas o en el régimen de funcionamiento del proceso, etc. (Fortuna y col., 2012; Khatibisepehr y col., 2012; King, 2017).

Considérese un proceso caracterizado por una variable de calidad, y , no medible (o cuya medición resulta extremadamente costosa o requiere excesivo tiempo). Un modelo matemático para inferir la variable de calidad $y(t) = y_t$ al tiempo t , sobre la base de las variables medibles $\mathbf{R}_t = [r_1(t) \cdots r_1(t)] = [r_{1t} \cdots r_{1t}]$, puede escribirse como:

$$\hat{y}_t = f(\mathbf{R}_t, \boldsymbol{\theta}) + \beta_t \quad (1)$$

donde el símbolo “^” indica valor estimado, $\boldsymbol{\theta} = [\theta_1 \cdots \theta_Q]$ son los Q parámetros que caracterizan al modelo f y $\beta_t = \beta(t)$ es el bias al tiempo t . Adicionalmente, dada una determinación de laboratorio \hat{y}_T^{lab} de la variable de calidad al tiempo T se define el error de predicción ε_T^p como sigue:

$$\varepsilon_T^p = \hat{y}_T^{lab} - \hat{y}_T = \hat{y}_T^{lab} - (f(\mathbf{R}_T, \boldsymbol{\theta}) + \beta_T) \quad (2)$$

En un enfoque clásico, las determinaciones de laboratorio se realizan a intervalos regulares ΔT , es decir a los tiempos $T = i \Delta T$ ($i = 1, 2, \dots$). En consecuencia, el valor del bias en la Ec. (1) se actualiza cada vez que se realiza una determinación de laboratorio de la variable de calidad y , por ejemplo, como sigue (King, 2017):

$$\beta_T = \beta_{T-1} + \frac{6}{n(n+1)(n+2)} \sum_{i=1}^n i(n-i+1) \varepsilon_{n-i+1}^p ; \quad n = 1, 2, \dots \quad (3)$$

$$\beta_T = \beta_{T-1} + a \varepsilon_T^p ; \quad 0 \leq a \leq 1 \quad (4)$$

Nótese que en la Ec. (3), el cálculo del bias se basa en la suma acumulada del error de predicción. En consecuencia, para $n = 1$, el bias se calcula según: $\beta_T = \beta_{T-1} + \varepsilon_T^p$; es decir, se asume que la estimación de laboratorio es correcta y se calcula el bias de forma de compensar cualquier diferencia con el laboratorio. Para $n = 2$ el bias resulta: $\beta_T = \beta_{T-1} + (\varepsilon_T^p + \varepsilon_{T-1}^p)/2$. Es decir, se ajusta según el promedio de los últimos dos valores de error. En general, valores grandes de n en la Ec. (3) resulta en adaptaciones de bias inestables. Por otro lado, en la Ec. (4) el cálculo de bias se realiza según un ajuste parcial del error de predicción mediante la aplicación de un parámetro de filtro a ($0 < a < 1$) el cual se adopta generalmente

en $a = 0.3$ (King, 2017). Desafortunadamente, los enfoques clásicos como los detallados en las Ecs. (3) y (4) no contemplan la naturaleza estadística del bias, el cual resulta una variable aleatoria. Adicionalmente, dichos enfoques requieren de la elección de un parámetro (n o a), y frecuentemente la elección óptima de dichos parámetros está fuertemente influenciada por el nivel de incertidumbre en las determinaciones de laboratorio, por el ruido introducido por los detectores, por la frecuencia de muestreo del laboratorio, etc.

El desarrollo de sensores inferenciales se ha abordado ampliamente en la literatura en diversas aplicaciones (Deng y col., 2012; Gonzales y col., 2011; Jie Yu, 2012; Khatibisepehr y col., 2012; Yang y col., 2016). Por ejemplo, Deng y col. (2012) utilizaron filtros de partículas para estimar parámetros de un modelo correspondientes a un proceso de extracción de petróleo. En este caso, la calibración se llevó a cabo mediante una estrategia Bayesiana sobre datos tanto en línea como de laboratorio. La metodología contempló también una actualización del bias. Gonzalez y col. (2011) utilizaron estrategias Bayesianas para estimar y separar ruidos en la medición y variaciones del proceso por perturbaciones en los datos. Por otro lado, Jie Yu (2012) desarrolló un sensor inferencial utilizando regresión con vectores de soporte de dos niveles para bioprocesos, obteniendo una mejora en la exactitud de la estimación y en la adaptación a perturbaciones en comparación a un modelo de vectores de soporte convencional. Khatibisepehr y col. (2012) propusieron un algoritmo Bayesiano para la calibración de sensores inferenciales multimodelo, como así también para la adaptación en línea del sensor, con el objetivo de mejorar las transiciones entre los diferentes modelos de inferencia. En su propuesta, el sensor incluyó un término de bias y un factor de escala, los cuales se adaptan en línea según un filtro de media móvil ponderado exponencialmente. Finalmente, Yang y col. (2016) propusieron un sensor basado en un conjunto de modelos de aprendizaje Just-in-time Gaussiano, en pos de mejorar la calidad de la predicción en el proceso de mezcla de caucho, valiéndose para ello de la capacidad de esta metodología para trabajar con no linealidades. Si bien el desarrollo de sensores inferenciales se ha abordado frecuentemente en la literatura, el estudio y desarrollo de nuevas metodologías para la adaptación del bias es escaso.

A diferencia de los enfoques clásico como los planteados en las Ecs. (3) y (4), en este trabajo se implementa un enfoque Bayesiano de estimación del bias. A tales efectos, se construye una función de densidad de probabilidad (FDP) para el bias cada vez que se realiza una determinación de laboratorio. Posteriormente, el bias se infiere mediante la maximización de dicha FDP. A diferencia de los métodos clásicos, el planteo propuesto no requiere de la elección de parámetros indefinidos.

2 ADAPTACION BAYESIANA DEL BIAS

El enfoque Bayesiano apunta a la obtención de una FDP para el bias β_T condicional a la observación de un valor de laboratorio \hat{y}_T^{lab} . Es decir, se busca $P(\beta_T) = P(\beta_T | \hat{y}_T^{lab})$, donde el símbolo “|” indica probabilidad condicional. Aplicando el teorema de Bayes, se obtiene (Armstrong, 2009; Khatibisepehr, 2012):

$$P(\beta_T) = P(\beta_T | \hat{y}_T^{lab}) \propto D(\hat{y}_T^{lab} | \beta_T) \times D(\beta_T) \quad (5)$$

donde $D(\hat{y}_t^{lab} | \beta_t)$ es la llamada función de verosimilitud y representa la probabilidad condicional de obtener un valor dado de la variable \hat{y}_t^{lab} dada una predicción obtenida con un valor de bias β_t ; y $D(\beta_T)$ es la distribución de probabilidades a priori para β_T , la cual codifica en términos de una distribución de probabilidades toda la información a-priori conocida (o supuesta) sobre el bias.

Se asume que el error de predicción ε_t^p se comporta aleatoriamente según una distribución

Gaussiana de media μ_p y desvío estándar σ_p . Bajo esta hipótesis, puede obtenerse una expresión para $D(\hat{y}_T^{lab}|\beta_T)$, como sigue:

$$D(\hat{y}_T^{lab}|\beta_T) = \frac{1}{\sigma_p\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2\sigma_p^2}[\varepsilon_T^p - \mu_p]^2} = \frac{1}{\sigma_p\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2\sigma_p^2}[\hat{y}_T^{lab} - (f(\mathbf{R}_T, \boldsymbol{\theta}) + \beta_T) - \mu_p]^2} \quad (6)$$

Por otro lado, dado que ε_T^p se distribuye según una distribución Gaussiana, es razonable asumir que el bias deberá comportarse en forma similar, y por lo tanto se propone una distribución a priori $D(\beta_T)$ Gaussiana como sigue:

$$D(\beta_T) = \frac{1}{\sigma_\beta\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2\sigma_\beta^2}[\beta_T - \mu_\beta]^2} \quad (7)$$

donde μ_β y σ_β son el valor medio y el desvío estándar del bias. Combinando las Ecs. (5), (6) y (7), se obtiene:

$$P(\beta_T) = P(\beta_T|\hat{y}_T^{lab}) \propto e^{-\frac{1}{2\sigma_p^2}[\hat{y}_T^{lab} - (f(\mathbf{R}_T, \boldsymbol{\theta}) + \beta_T) - \mu_p]^2 - \frac{1}{2\sigma_\beta^2}[\beta_T - \mu_\beta]^2} \quad (8)$$

Finalmente, el β_T puede calcularse maximizando la FDP de la Ec. (8), o mediante la minimización de la siguiente función:

$$\min_{\beta_T} \left[\frac{1}{2\sigma_p^2} [\hat{y}_T^{lab} - (f(\mathbf{R}_T, \boldsymbol{\theta}) + \beta_T) - \mu_p]^2 + \frac{1}{2\sigma_\beta^2} [\beta_T - \mu_\beta]^2 \right] \quad (9)$$

2.1 Determinación de la FDP A-Priori

Bajo las hipótesis planteadas en la sección anterior, la determinación de la FDP a-priori se reduce a obtener la media y varianza, μ_β y σ_β^2 , que caracterizan a dicha distribución de probabilidades. Para ello, se reescribe la Ec. (2) como sigue:

$$\varepsilon_T^p = \hat{y}_T^{lab} - \hat{y}_T = \hat{y}_T^{lab} - f(\mathbf{R}_T, \boldsymbol{\theta}) - \beta_T = \varepsilon_T^{p*} - \beta_T \quad (10)$$

donde $\varepsilon_T^{p*} = \hat{y}_T^{lab} - f(\mathbf{R}_T, \boldsymbol{\theta})$ es el error de predicción considerando un bias nulo. A partir de la Ec. (10), puede razonarse que:

$$\mu_p = \mu_{p*} - \mu_\beta \quad (11)$$

$$\sigma_p^2 = \sigma_{p*}^2 + \sigma_\beta^2 - 2 \times Cov(\varepsilon_T^{p*}, \beta_T) \quad (12)$$

donde *Cov* indica covarianza. De la Ec. (11) puede razonarse que para obtener $\mu_p = 0$ debe cumplirse $\mu_\beta = \mu_{p*}$. Por otro lado, de la Ec. (12) se observa que para obtener el menor valor de varianza σ_p^2 del error de predicción ε_T^p , el término $2 \times Cov(\varepsilon_T^{p*}, \beta_T)$ debe ser máximo, lo cual idealmente se logra con $\varepsilon_T^{p*} = \beta_T$, y en consecuencia se escoge $\sigma_\beta^2 = \sigma_{p*}^2$.

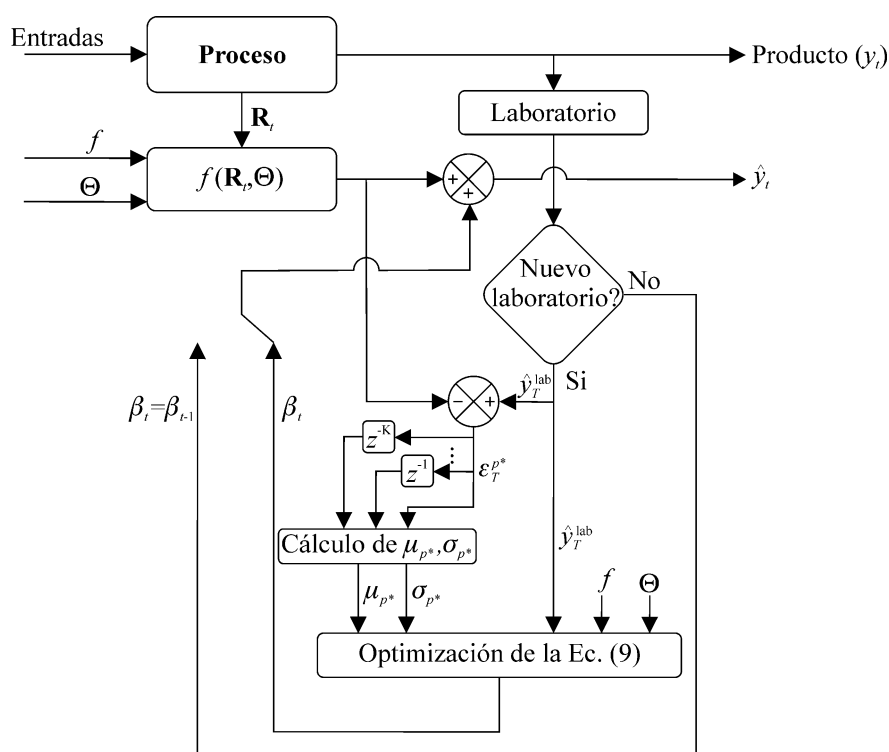


Figura 1: Representación esquemática del enfoque para adaptación Bayesiana del Bias.

La Figura 1 presenta un diagrama esquemático en bloques del enfoque Bayesiano propuesto para adaptación del bias. El método inicia con el arribo de una determinación de laboratorio (o un analizador en línea) \hat{y}_T^{lab} , a partir del cual se calcula el error de predicción ε_T^{p*} . A partir de ε_T^{p*} y sus valores pasados, $\varepsilon_{T-1}^{p*}, \dots, \varepsilon_{T-K}^{p*}$, se calcula la media μ_{p*} y el desvío estándar σ_{p*} del error de predicción. Finalmente, se maximiza la FDP de la Ec. (8) mediante el problema de optimización representado por la Ec. (9), para estimar el valor de bias β_T .

3 ANÁLISIS DE EJEMPLO SIMULADO: SÍNTESIS INDUSTRIAL CONTINUA DE CAUCHO ESTIRENO-BUTADIENO

El caucho estireno-butadieno (SBR) es un polímero utilizado principalmente en la industria de los neumáticos. Se sintetiza generalmente en un proceso continuo llevado a cabo a 10°C de temperatura en un tren de reactores tanque agitado continuo. En general, los monómeros (estireno: S, y butadieno: B) y demás reactivos (iniciador: I, agua, agentes de transferencia de cadena: CTA, etc.) necesarios para la reacción de polimerización se alimentan en el primer reactor en forma continua y el producto se retira por el último reactor. Debido a que el proceso debe llevarse a cabo a una temperatura controlada de 10 °C, por cada tanque circula refrigerante, el cual extrae el calor generado en la reacción de polimerización exotérmica. El caudal de refrigerante evaporado, G_R , y la temperatura en cada tanque pueden medirse en línea y utilizarse para determinar el calor generado en cada tanque Gugliotta y col. (1995).

Gugliotta y col. (1995) desarrollaron un modelo no-lineal detallado basado en primeros principios del proceso de síntesis del SBR en un sistema de 10 tanques agitados continuos. Los parámetros del modelo se ajustaron para reproducir los datos experimentales obtenidos de una planta industrial. El modelo incluye tres módulos interconectados, el módulo de balance de masa (MBM), el de pesos moleculares (MPM) y el de balance de energía (MBE). El MBM permite calcular variables como la composición del copolímero, la conversión acumulada x en cada reactor, la concentración de monómeros, entre otras variables, mientras que el MBE

calcula la temperatura en los reactores, y el flujo de refrigerante evaporado en cada reactor.

Una variable de importancia en el proceso de síntesis del SBR es la conversión acumulada de monómero, $x(t)$, en el reactor final, la cual refleja el porcentaje de monómero reaccionado. Debido a que no existen sensores para medir en forma directa la conversión de monómero, se plantea la utilización de un sensor inferencial para estimar $x(t)$ a partir de mediciones de los caudales de alimentación de S, B, I, y CTA en el primer tanque y los caudales de refrigerante evaporado en cada tanque, $G_{R,i}(t)$ ($i = 1, \dots, 10$).

3.1 Diseño e Implementación del Sensor Inferencial

El sensor inferencial responde a la siguiente expresión:

$$x_t = \theta_1 G_{S_t} + \theta_2 G_{B_t} + \theta_3 G_{I_t} + \theta_4 G_{CTA_t} + \theta_5 G_{R,1_t} + \dots + \theta_{14} G_{R,14_t} + \beta_t \quad (13)$$

donde G indica caudal másico y los parámetros θ se determinan mediante una etapa de calibración previa. La Ec. (13) puede escribirse en forma compacta utilizando notación matricial, como sigue:

$$x_t = \mathbf{R}_t \times \boldsymbol{\theta} + \beta_t \quad (14)$$

donde $\boldsymbol{\theta} = [\theta_1 \dots \theta_{14}]$ y $\mathbf{R}_t = [G_{S_t} \ G_{B_t} \ G_{I_t} \ G_{CTA_t} \ G_{R,1} \ \dots \ G_{R,14}]$.

La calibración del sensor se llevó a cabo mediante una simulación de aproximadamente 2,000 horas de proceso. En ese periodo se simuló la producción de SBR bajo tres regímenes de carga diferentes, cada uno correspondiente a una producción de 114 gal/min, 100 gal/min y 84 gal/min. En cada régimen de producción simulado, los caudales de S, B, I y CTA se ajustaron para obtener un producto en el tanque 10 que cumpla los requerimientos de composición y conversión. Además, a lo largo de la simulación, se perturbaron los caudales de S, B, I y CTA, en +/- 5%, para registrar su incidencia en la variable de salida x . Durante toda la simulación se registraron los caudales de S, B, I y CTA, y los de refrigerante evaporado en cada tanque. También, se simuló la determinación de laboratorio mediante una toma de muestra en el tanque 10 cada 4 horas (es decir a los $T = 4, 8, \dots$) para la determinación de la conversión \hat{x}_T^{lab} . Para evaluar casos cercanos a la realidad, las variables medidas \mathbf{R}_t se contaminaron con ruido característico de los sensores de medición, según:

$$\tilde{\mathbf{R}}_t = \mathbf{R}_t + \boldsymbol{\varepsilon}_R(\boldsymbol{\mu}_R, \boldsymbol{\sigma}_R) \quad (15)$$

donde el símbolo “ \sim ” indica valor contaminado con ruido del sensor, y $\boldsymbol{\varepsilon}_R(\boldsymbol{\mu}_R, \boldsymbol{\sigma}_R) = [\varepsilon_{G_S}(\mu_{G_S}, \sigma_{G_S}), \varepsilon_{G_B}(\mu_{G_B}, \sigma_{G_B}), \dots, \varepsilon_{G_{R,10}}(\mu_{G_{R,10}}, \sigma_{G_{R,10}})]$ es el vector de ruido de sensores, los cuales exhiben distribución Gaussiana de media μ y desvío σ . Finalmente, los valores de laboratorio \hat{x}_T^{lab} se simularon mediante:

$$\hat{x}_T^{lab} = x_T + \varepsilon_{lab}(\mu_{lab}, \sigma_{lab}) \quad (16)$$

Por último, el cálculo de los parámetros del sensor se llevó a cabo mediante un método de mínimos cuadrados, según:

$$\boldsymbol{\theta} = (\mathbf{R}' \times \mathbf{R})^{-1} \times \mathbf{R}' \times \mathbf{x}^{lab} \quad (17)$$

donde el símbolo “ $'$ ” indica transpuesta de la matriz, \mathbf{x}^{lab} es el vector cuyas componentes son las determinaciones de laboratorio a los tiempos $T = 4, 8, \dots$ y \mathbf{R} es la matriz cuyas filas son las mediciones $\mathbf{R}_t = [G_{S_t} \ G_{B_t} \ G_{I_t} \ G_{CTA_t} \ G_{R,1} \ \dots \ G_{R,14}]$ a los mismos tiempos T .

La Figura 2a compara el valor de la conversión \hat{x}_T^{lab} y la calculada a partir del sensor inferencial de la Eq. (14), con $\beta_t = 0$. Nótese que el sensor logra reproducir aceptablemente la conversión, indicando un buen ajuste de los parámetros del modelo durante la calibración.

La Figura 2b presenta un histograma obtenido para el error porcentual de predicción. Nótese que el error exhibe una distribución aproximadamente Gaussiana de media nula y desvío estándar aproximadamente 2%, lo cual concuerda con la hipótesis de normalidad planteada.

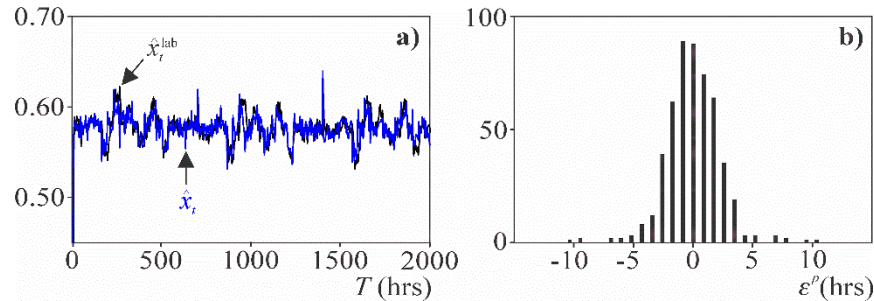


Figura 2: Calibración del sensor inferencial. a) Comparación de los valores simulados de laboratorio de la conversión, \hat{x}_T^{lab} , y la correspondiente estimación por el sensor calibrado, \hat{x}_T . b) Histograma del error de predicción, $\epsilon^p = \hat{x}_T^{lab} - \hat{x}_T$,

3.2 Adaptación de Bias

Para evaluar la metodología de adaptación de bias propuesta se simularon 164 horas del proceso de síntesis de SBR en dos regímenes de producción, 117 gal/min y 67 gal/min (82 horas de producción en cada régimen). Para dicha simulación, se registraron cada un minuto las variables de entrada al sensor (G_S , G_B , G_I , G_{CTA} , $G_{R,i}$) las cuales se afectaron con ruido Gaussiano de medición (según la Ec. (15)) de media nula ($\mu = 0$) y desvío estándar σ igual al 1% de la media de cada señal. También, se realizó el muestreo de la conversión x cada 4 horas según la Ec. (16) y se le añadió un error Gaussiano de laboratorio de media nula y desvío estándar igual al 1% del valor medio de la señal. Se analizaron 6 casos de interés. Caso 1: no existen perturbaciones; Caso 2: la mediciones de laboratorio se degradan originándose un aumento al 3% en el desvío estándar del error de laboratorio; Caso 3: el control de temperatura de la reacción es deficiente, lo que lleva a la temperatura a oscilar entre 8 y 12 °C; Caso 4: en el periodo [75 hrs – 95 hrs] se produce un desperfecto en el sensor de caudal de refrigerante en el tanque 10 ($G_{R,10}$), el cual retiene el ultimo valor medido durante todo este periodo; Caso 5: en el periodo [75 hrs – 95 hrs] se produce el desperfecto que genera un offset de 10% en el sensor de caudal de butadieno (B); y Caso 6: se producen simultáneamente las perturbaciones de los Casos 2, 3, 4 y 5. Para cada caso analizado se utilizó el sensor inferencial de la Ec. (14) con el ajuste Bayesiano del bias. El cálculo del valor medio y desvío estándar del error de predicción (requeridos para calcular μ_β y σ_β) se realizó según las siguientes expresiones:

$$\mu_{p^*} = (1/K) \sum_{k=1}^K \epsilon_{T-k}^{p^*} \quad (18)$$

$$\sigma_{p^*} = (1/d_2) [\max(\epsilon_{T-K}^{p^*} \dots \epsilon_T^{p^*}) - \min(\epsilon_{T-K}^{p^*} \dots \epsilon_T^{p^*})] \quad (19)$$

donde $K = 4$, y d_2 se encuentra tabulado (Montgomery, 2009).

A modo de comparación, se implementa también el planteo clásico de la Ec. (3) con $n=2$ y $n=3$, y el planteo de la Ec. (4). El desempeño de cada metodología se evalúa en término de los siguientes índices:

$$ECM = \frac{\sum_{t=0}^{tf} (\epsilon_t^e)^2}{tf} \quad (20)$$

$$\sigma_{\varepsilon} = \sqrt{\frac{\sum_{t=0}^{tf} (\varepsilon_t^e - \mu_{\varepsilon})^2}{tf}} \tag{21}$$

donde ECM, μ_{ε} y σ_{ε} son el error cuadrático medio, el valor medio y el desvío estándar del error porcentual de estimación, $\varepsilon_t^e = 100 (x_t - \hat{x}_t)/x_t$, respectivamente, medido con respecto al valor verdadero de la conversión al tiempo t ; y t es el tiempo medido en minutos, desde 0 hasta $tf = 9,840$ min (correspondiente a 164 hrs). Nótese que el error de estimación, el cual cuantifica la diferencia con el valor verdadero de la conversión, difiere del error de predicción el cual mide la diferencia de la estimación con respecto el valor determinado por laboratorio. El error de estimación es imposible de calcular en la práctica, debido a que el valor real de la conversión es desconocido.

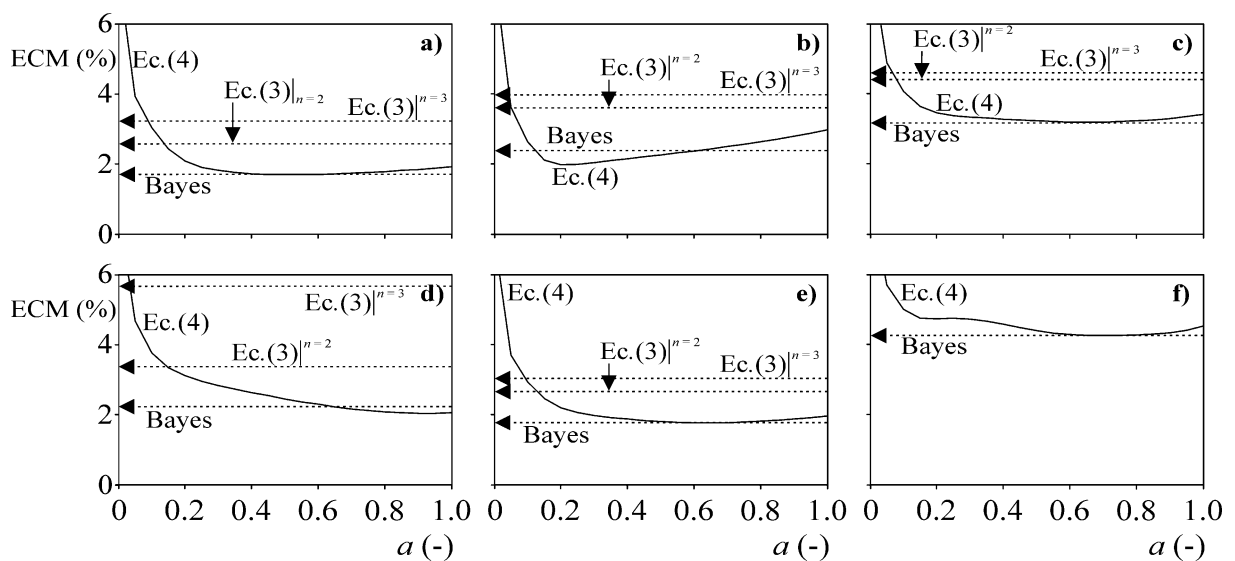


Figura 3: Comparación de índice de desempeño ECM (Ec. (20)) obtenido mediante el ajuste del bias por la Ec. (3) con $n = 2$ y 3 , la Ec. (4) para $0 \leq a \leq 1$, y el enfoque Bayesiano propuesto. a) Casos 1, b) Caso2, c) Caso 3, d) Caso 4, e) Caso 5, y f) Caso 6 (valores correspondientes a la Ec. (3) resultan fuera de escala).

Los resultados se resumen en las Figuras 3 a 5. Las Figuras 3 y 4 muestran los índices ECM y σ_{ε} obtenidos con el enfoque clásico de la Ec. (4) en función del parámetro a . Para comparación, también se muestran dichos índices obtenidos mediante el enfoque de la Ec. (3) con $n= 2$ y 3 , y el nuevo enfoque Bayesiano propuesto. De las Figuras 3 y 4 puede observarse la dependencia del ECM y σ_{ε} con el parámetro a correspondiente al ajuste del bias mediante la Ec. (4). Esta es la principal desventaja de este tipo de ajuste de bias, ya que si bien existen situaciones donde la dependencia del ECM y σ_{ε} con el parámetro a es despreciable (como por ejemplo en los casos 1, 3 y 5 donde el ECM es casi constante para $a > 0.2$), existen situaciones donde exhibe una alta sensibilidad de los índices de desempeño al parámetro a (como en los casos 2, 4 y 6). En consecuencia, en aplicaciones prácticas en donde se adopta un valor constante para a , el desempeño del sensor inferencial puede resultar deficiente ante presencia de perturbaciones. En forma similar, el enfoque clásico de la Ec. (3) evidencio un desempeño por debajo del obtenido con la Ec. (4). Por el contrario, en la Figura 4 puede verse que tanto ECM como σ_{ε} obtenidos mediante el enfoque Bayesiano propuesto resulta en todos los casos muy cercano al mínimo obtenido mediante el enfoque clásico de la Ec. (4). Este resultado es significativo desde el punto de vista operacional del método de adaptación de bias, ya que se asegura un buen desempeño del sensor inferencial sin requerir del ajuste de parámetros indefinidos.

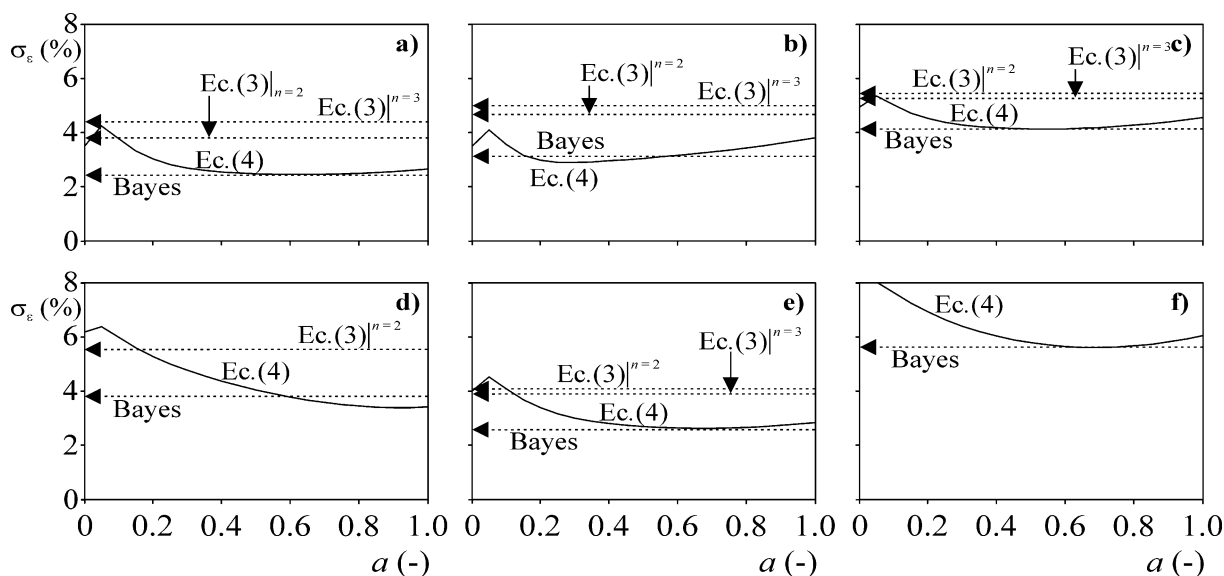


Figura 4: Comparación de índice de desempeño σ_ϵ (Ec. (21)) obtenido mediante el ajuste del bias por la Ec. (3) con $n = 2$ y 3 , la Ec. (4) para $0 \leq a \leq 1$, y el enfoque Bayesiano propuesto. a) Casos 1, b) Caso2, c) Caso 3, d) Caso 4, e) Caso 5, y f) Caso 6 (valores correspondientes a la Ec. (3) resultan fuera de escala).

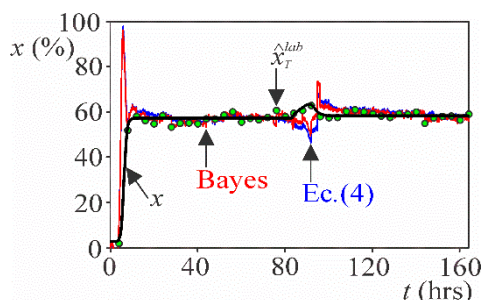


Figura 5: Estimación de la conversión x para perturbaciones correspondientes a los Casos 2, 4 y 5 simultáneos. Se muestra la conversión real x , las determinaciones de laboratorio \hat{x}_T^{lab} , y las estimaciones basadas en el sensor inferencial con ajuste de bias por la Ec. (4) ($a = 0.3$) y el enfoque Bayesiano propuesto.

Finalmente, la Figura 5 muestra, a modo de ejemplo, la conversión x real, los valores de laboratorio simulados \hat{x}_T^{lab} , y las determinaciones obtenidas mediante el enfoque clásico de la Ec. (4) con $a = 0.3$, y el enfoque Bayesiano propuesto, para una perturbación producida simultáneamente por los Casos 2, 4 y 5. De la figura puede verse que la conversión real x , luego de un transitorio en las primera 10 hrs, se estabiliza en $x = 57.3\%$, valor que se mantiene hasta aproximadamente $t = 83$ hrs, tiempo en el cual se produce la transición al nuevo régimen de producción. Este cambio de régimen genera un nuevo transitorio, el cual finaliza aproximadamente a $t = 101$ hrs, luego del cual la conversión se estabiliza en $x = 58.4\%$. Por otro lado, el sensor inferencial con ajuste Bayesiano del bias produce un valor de conversión cuyo valor promedio es de 57.10% en el periodo [10 hrs – 83 hrs] y de 58.8% en el periodo [100 hrs – 164 hrs]. Es decir, aunque el salto en la conversión es de tan solo 1.1% , el sensor inferencial con ajuste Bayesiano logró detectarlo. Este resultado permite comprender la importancia de la sensibilidad del enfoque clásico (Ec. (4)) al parámetro a . Por ejemplo, en la Figura 3d puede verse que para el Caso 4 analizado, el ECM producido para con ajuste de bias por la Ec. (4) con $a = 0.3$ resulta aproximadamente 1% superior al obtenido mediante el ajuste Bayesiano del bias. Esta diferencia, aunque pueda parecer pequeña, podría repercutir en un desempeño deficiente del sensor inferencial y su imposibilidad de diferenciar entre ambos regímenes de

producción.

4 CONCLUSIONES

Se desarrolló y evaluó una metodología novedosa para adaptar el bias en sensores inferenciales. A diferencia de los métodos clásicos de adaptación, el método propuesto no requiere de la selección de ningún parámetro indefinido. En su lugar, el algoritmo calcula el valor del bias mediante maximización de una FDP construida a partir de las determinaciones de laboratorio y las características estadísticas (media y desvío estándar) del error de predicción.

La metodología propuesta se evaluó sobre la base de un modelo de producción de caucho SBR ajustado en planta con datos experimentales. Se analizó el desempeño de la misma ante la presencia de diferentes perturbaciones sobre los sensores que miden las variables de entrada al sensor, y sobre las determinaciones de laboratorio. En todos los casos analizados, la metodología resultó satisfactoria, logrando resultados similares o mejorados respecto de los métodos clásicos de ajuste de bias.

Si bien la metodología se evaluó sobre un sensor inferencial constituido por una regresión lineal, el mismo puede adaptarse en forma directa a cualquier otro tipo de sensor, como ser los basados en primeros principios, regresiones no lineales, redes neuronales, etc.

REFERENCIAS

- Armstrong, N., Hibbert, D.B., An Introduction to Bayesian Methods for Analyzing Chemistry Data Part 1: An Introduction to Bayesian Theory and Methods, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 97: 194-210, 2009.
- Denga, J., Xiea, L., Chena, L., Khatibisepehr, S., Huang, B., Xub, F., Espejo, A., Development and industrial application of soft sensors with on-line Bayesian model updating strategy, *Journal of Process Control*, 23: 317-325, 2013.
- Fortuna, L., Graziani, S., Rizzo, A., Xibilia, M.G., *Soft Sensors for Monitoring and Control of Industrial Processes*, Springer, 2007.
- Gonzalez, R., Huang, B., Xu, F., Espejo, A., Estimation of Instrument Variance and Bias Using Bayesian Methods, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 50: 6229-6239, 2011.
- Gugliotta, L.M., Brandolini, M.C., Vega, J.R., Iturralde, E., Azum, J.L., Meira, G.R., Dynamic Model of a Continuous Emulsion Copolymerization of Styrene and Butadiene, *Polymer Reaction Engineering*, 3:201-233, 1995.
- Khatibisepehr, S., Huang, B., Xu, F., Espejo, A., A Bayesian Approach to Design of Adaptive Multi-model Inferential Sensors with Application in Oil Sand Industry, *Journal of Process Control*, 22: 1913-1929, 2012.
- Khatibisepehr, S., Huang, B., Khare S., Design of Inferential Sensors in the Process Industry: A Review of Bayesian Methods, *Journal of Process Control*, 23: 1575-1596, 2013.
- King, M., *Statistics for Process Control Engineers*. Wiley, 2017.
- Montgomery, D.C., *Introduction to Statistical Quality Control*, Wiley, 2009.
- Yu, J. A Bayesian inference based two-stage support vector regression framework for soft sensor development in batch bioprocesses, *Computers and Chemical Engineerin*, 41: 134-144, 2012.
- Yang, K., Jin, H., Chen, X., Dai, J., Wang, L., Zhang, D. Soft sensor development for online quality prediction of industrial batch rubber mixing process using ensemble just-in-time Gaussian process regression models, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 155: 170-182, 2016.