

ASISTENTE DE OPTIMIZACIÓN Y LINEALIZACIÓN PARA LA HERRAMIENTA DE MODELADO Y SIMULACIÓN ECOSIMPRO

Alberto Jorrín

Dpto. de Ingeniería de Sistemas y Automática (Facultad de Ciencias)
Universidad de Valladolid, albejor@autom.uva.es

Diego García

Dpto. de Ingeniería de Sistemas y Automática (Facultad de Ciencias)
Universidad de Valladolid, dieggar@cta.uva.es

César de Prada

Dpto. de Ingeniería de Sistemas y Automática (Facultad de Ciencias)
Universidad de Valladolid, prada@autom.uva.es

Smaranda Cristea

Dpto. de Ingeniería de Sistemas y Automática (Facultad de Ciencias)
Universidad de Valladolid, smaranda@autom.uva.es

Resumen

*En este artículo se presenta un asistente que se ha desarrollado con el objetivo de permitir a los usuarios de la herramienta de modelado y simulación **EcosimPro**, resolver problemas de **optimización** y **estimación de parámetros** sobre modelos almacenados previamente en dicha herramienta ó incluso **linealizar** dichos modelos.*

Palabras Clave: Optimización, estimación de parámetros, linealización.

1 INTRODUCCIÓN

EcosimPro es una herramienta de modelado y simulación de sistemas dinámicos. Éstos han de ser representados por ecuaciones algebraico-diferenciales y eventos discretos.

Dichos sistemas dinámicos son representados por modelos ó componentes que se codifican en un lenguaje llamado EL. De este modo el modelador puede crear y reutilizar librerías de componentes (por ejemplo válvulas, tuberías, calderas,...).

EcosimPro se encarga internamente de extraer las ecuaciones del modelo final, transformarlas simbólicamente, detectar problemas de exceso de variables, resolver automáticamente lazos algebraicos lineales y no lineales y reducir el índice (por medio de derivación simbólica) cuando se encuentre problemas sobredeterminados.

Al final son llamados resolvedores de ecuaciones lineales, no lineales y de ecuaciones algebraico-diferenciales. Todo esto permanece oculto al modelador, con lo cual se puede concentrar en el sistema físico a modelar, dejando a EcosimPro preocuparse de los aspectos complejos de manejo y optimización del modelo matemático.

Lo que se ha desarrollado es un asistente en el que se pueden encontrar tres funcionalidades:

- Optimización de modelos
- Estimación de parámetros de un modelo
- Linealización de modelos.

Por ello se explicará cada una de estas funcionalidades en diferentes apartados.

2 ASISTENTE DE OPTIMIZACIÓN

2.1 DESCRIPCIÓN GENERAL

El asistente de optimización general tiene como objetivo facilitar al usuario la definición y resolución de los problemas de optimización.

A través de esta herramienta, el usuario puede obtener los valores óptimos para las variables deseadas de un modelo "EL" cualquiera. El usuario solo tendrá que elegir un modelo y su correspondiente partición. A partir de ese momento el asistente le irá solicitando toda la información necesaria para resolver un problema de optimización

concreto. El usuario tiene que especificar por ejemplo la función objetivo, las variables de decisión, las restricciones y otra serie de opciones útiles. Finalmente cuando el trabajo de la herramienta llega a su fin, el usuario tendrá en el árbol de experimentos de EcosimPro, dos nuevos elementos para monitorizar las soluciones, simular el modelo con los valores óptimos, obtener gráficas,... Estos dos nuevos experimentos son:

- a) El experimento de optimización: al correr este experimento la solución óptima obtenida será almacenada en un fichero llamado "solution.txt".
- b) El experimento de simulación para correr el modelo con los valores óptimos que se obtuvieron a través del experimento de optimización. Dichos valores óptimos se obtendrán al leer el fichero "solution.txt" que generó la ejecución de dicho experimento.

Para obtener las soluciones el usuario podrá optar por diferentes revolvedores, entre los que están un algoritmo SQP que es extraído directamente de las librerías NAG y un algoritmo genético que se incluirá por defecto dentro de la instalación normal de EcosimPro.

2.2 DESCRIPCIÓN GENERAL DE LA OPTIMIZACIÓN

La "ciencia" de la optimización es la ciencia que se encarga de decidir **como tomar la mejor opción entre varias posibles**.

Se afrontarán aquí problemas de naturaleza muy diversa como por ejemplo problemas de:

- Diseño (p.e. dimensionamiento de un equipo con costo mínimo)
- Operación (p.e. punto de operación mas rentable)
- Logística (p.e. ruta mas corta de distribución de un producto)
- Planificación (p.e. mejor lugar para construir una planta)
- Control (p.e. acción de control que genera menos varianza en la variable controlada)
- Etc.

Además se presentan en campos muy diversos como procesos, economía, biología, electrónica,...

Pero todos tienen rasgos comunes:

- Un objetivo o criterio a optimizar,
- Unas variables de decisión,
- Un conjunto de ligaduras y restricciones sobre las variables de decisión.

La metodología de trabajo ([1], [2], [3]) que se suele seguir es la siguiente:

1º) Analizar el problema

2º) Formularlo en términos matemáticos

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} J(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ h(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \\ g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 0 \end{aligned} \quad (1)$$

donde \mathbf{x} es el vector de variables de decisión independientes, J es la función de costo que se quiere minimizar, $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ un conjunto de ecuaciones de igualdad que debe cumplir el vector de decisión y $\mathbf{g}(\mathbf{x}) < \mathbf{0}$ otro conjunto de ecuaciones de desigualdad que también debe de cumplir.

3º) Resolverlo con los algoritmos y software adecuados

4º) Interpretar y aplicar la solución

2.3 DESCRIPCIÓN DEL ASISTENTE

Para usar el asistente de optimización general, el usuario debe seguir los siguientes pasos:

- 1) Elegir un modelo EL que contenga el modelo que el usuario desea optimizar.
- 2) Generar una partición para ese modelo.

- 3) Iniciar el asistente de optimización general: esto puede realizarse siguiendo la siguiente secuencia en el menú “Tools” de EcosimPro:

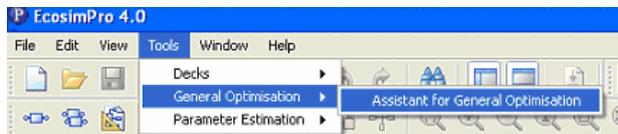


Figura 1: Menú de acceso al asistente de optimización general

- 4) Seleccionar la partición asociada al modelo elegido:

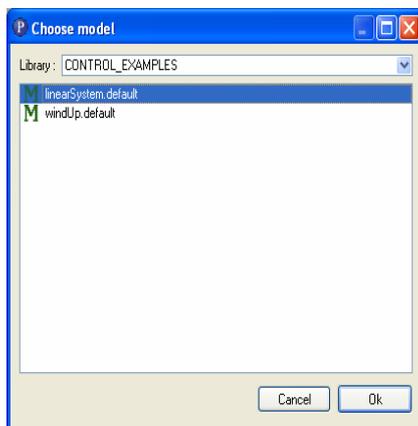


Figura 2: Selección de una partición

- 5) Finalmente el usuario debe seguir los siguientes pasos a través del asistente:
 - a. Selección del método de optimización
 - b. Introducción de la función objetivo
 - c. Selección de las variables de decisión
 - d. Introducción de distintos tipos de restricciones (penalti, path, hard)
 - e. ...

Se muestra a continuación una de las pantallas del asistente para que pueda verse su apariencia:

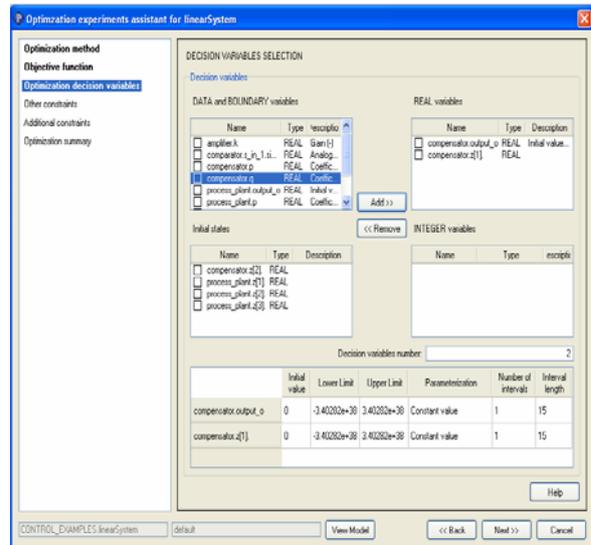


Figura 3: Diálogo del asistente de optimización general

3 ASISTENTE DE ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS

3.1 DESCRIPCIÓN GENERAL

El asistente de estimación de parámetros tiene como objetivo facilitar al usuario la definición y resolución de los problemas de estimación de parámetros. El problema de estimación de parámetros es un caso concreto del problema de optimización general.

A través de esta herramienta, el usuario podrá estimar de forma óptima los parámetros de un modelo “EL” cualquiera. El usuario solo tendrá que elegir un modelo y su correspondiente partición, a partir de ese momento el asistente le irá solicitando toda la información necesaria para resolver un problema de estimación de parámetros concreto. El usuario tiene que especificar por ejemplo las entradas, las salidas, las variables de decisión y las restricciones del proceso de estimación de parámetros, además de otra serie de opciones útiles.

Del mismo modo que en el asistente de optimización general que se describió en los apartados anteriores, cuando el trabajo de la herramienta llega a su fin, el usuario tendrá en el árbol de experimentos de EcosimPro, dos nuevos elementos para monitorizar las soluciones, simular el modelo con los valores óptimos, obtener gráficas,... Estos dos nuevos experimentos son:

- a) El experimento de estimación de parámetros: al correr este experimento la solución óptima obtenida será almacenada en un fichero llamado "solution.txt".
- b) El experimento de simulación para correr el modelo con los parámetros óptimos que se obtuvieron a través del experimento de estimación de parámetros. Dichos valores óptimos se obtendrán al leer el fichero "solution.txt" que generó la ejecución de dicho experimento.

Igualmente que en el caso anterior, para obtener las soluciones el usuario podrá optar por diferentes revolvedores, entre los que están un algoritmo SQP que es extraído de las librerías NAG y un algoritmo genético que se incluirá por defecto dentro de la instalación normal de EcosimPro.

3.2 DESCRIPCIÓN GENERAL DE LA ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS

En base a unos datos de salida que indican como se ha comportado el sistema (Y; salidas), tras haberle proporcionado distintas entradas (U; señales de control); este problema trata de determinar cual es el valor de ciertos parámetros del modelo que hacen que éste se ajuste la mejor manera posible a los datos experimentales. En este problema las variables de decisión son algunos parámetros desconocidos del modelo, la función objetivo suele ser del tipo:

$$\min \sum (y_{\text{modelo}}(t) - y_{\text{experimento}}(t))^2 \quad (2)$$

y las restricciones están formadas por las ecuaciones del modelo mas los límites que se quieran imponer en el rango de los parámetros.

Como puede observarse el problema de la estimación de parámetros es un caso concreto de optimización, con la peculiaridad de tener siempre la misma función objetivo. Dicha función objetivo representa el grado de bondad con que la simulación ajusta los datos. El trabajo de la estimación de parámetros consiste por tanto en determinar los parámetros del modelo para encontrar el mínimo valor de la función indicada.

3.3 DESCRIPCIÓN DEL ASISTENTE

Para usar el asistente de optimización general, el usuario debe seguir los siguientes pasos:

- 1) Elegir un modelo EL que contenga el modelo sobre el que el usuario desea estimar parámetros.
- 2) Generar una partición para ese modelo.
- 3) Iniciar el asistente de estimación de parámetros: esto puede realizarse siguiendo la siguiente secuencia en el menú "Tools" de EcosimPro:

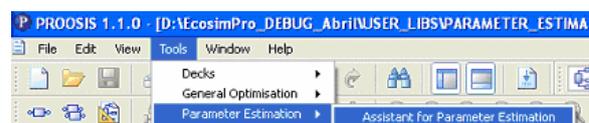


Figura 4: Menú de acceso al asistente de estimación de parámetros

- 4) Seleccionar la partición asociada al modelo elegido:

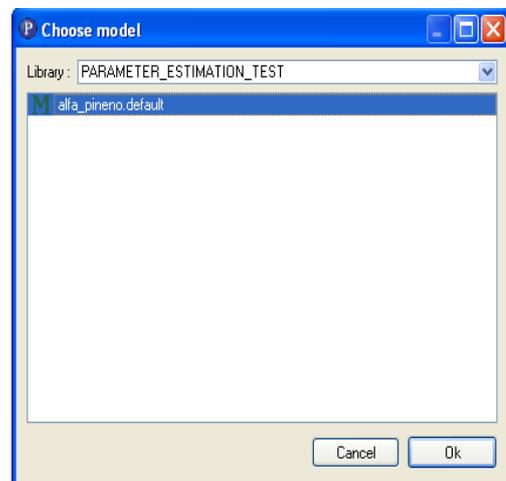


Figura 5: Selección de una partición

- 5) Finalmente el usuario debe los siguientes pasos a través del asistente:

- f. Selección del método de optimización
- g. Selección de los datos experimentales de entrada

- h. Selección de los estados iniciales
- i. Selección de los datos experimentales de salida
- j. Selección de las variables de decisión ó parámetros a estimar.
- k. Introducción de distintos tipos de restricciones (penalti, path, hard)
- l. ...

Se muestra a continuación una de las pantallas del asistente para que pueda verse su apariencia:

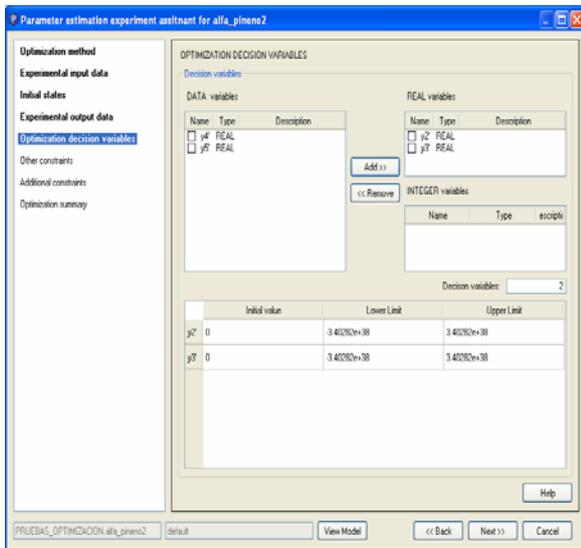


Figura 6: Diálogo del asistente de estimación de parámetros.

4 ASISTENTE DE LINEALIZACIÓN DE MODELOS

4.1 DESCRIPCIÓN GENERAL

Se trata de un asistente para permitir a los usuarios de EcosimPro linealizar modelos de forma sencilla y rápida. La técnica que se aplica es la linealización por incrementos.

Para poder comenzar a utilizar el asistente de linealización el usuario deberá tener su modelo no lineal almacenado en una de las librerías de EcosimPro. Además se deberá tener cargada la librería de EcosimPro "LINEAR", pues contiene declaraciones de métodos externos que implementan funciones relacionadas con la linealización como por

ejemplo el cálculo de autovalores de una matriz. De este modo iniciando el asistente se comenzará la introducción de una serie de informaciones (especificación de "entradas", "estados", "salidas", punto de linealización) necesarias para poder convertir el modelo no lineal en uno lineal a través del método indicado.

Tras finalizar la fase de introducción de datos lo que se obtendrá fundamentalmente es el nuevo modelo lineal. Este proceso de linealización se realizará de forma no transparente al usuario. Se mostrarán en un fichero ".rpt" las cuatro matrices (A, B, C, D) características del proceso de linealización de un modelo junto con los autovalores de la matriz A. El usuario obtendrá:

- ✓ Un experimento asociado al modelo base no lineal. Este experimento deberá ejecutarse para obtener las matrices características de linealización, que se almacenarán en cuatro ficheros de texto llamados "A.txt", "B.txt", "C.txt", "D.txt".
- ✓ Un nuevo modelo lineal equivalente al modelo base no lineal. Dicho modelo leerá las matrices características almacenadas en los ficheros que se indicaron anteriormente y aparecerá en el árbol de modelos de EcosimPro.
- ✓ Un componente con topología que instancia a los modelos no lineal de partida y al modelo lineal obtenido.
- ✓ Un experimento asociado al componente topológico, que permitirá simularlo y comparar los resultados que se obtienen en las salidas de cada correspondiente modelo al modificar las entradas de cada modelo. Dicho experimento aparecerá automáticamente en el árbol de experimentos de EcosimPro.
- ✓ Un fichero .CFG de configuración asociado al componente topológico, que mostrará como evolucionan las salidas comparándolas para el modelo no lineal y el lineal.

4.2 DESCRIPCIÓN GENERAL DE LA LINEALIZACIÓN

Linealizar un modelo consiste en obtener aproximaciones lineales de unas ecuaciones no lineales. Estas aproximaciones serán más fáciles de manipular matemáticamente pero su rango de validez es limitado.

Así, para obtener la linealización se realiza un desarrollo en serie de Taylor sobre un punto de operación (u_0, y_0, z_0) :

$$f(u, y, z) = 0 \quad f(u_0, y_0, z_0) = 0$$

$$f(u, y, z) = f(u_0, y_0, z_0) + \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_0 (u - u_0) + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_0 (y - y_0) + \left. \frac{\partial f}{\partial z} \right|_0 (z - z_0) + .. \quad (3)$$

creándose una nueva ecuación lineal, haciendo uso de nuevas variables incremento. Sean estos incrementos: $\Delta u, \Delta y, \Delta z$.

$$\left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_0 \Delta u + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_0 \Delta y + \left. \frac{\partial f}{\partial z} \right|_0 \Delta z = 0 \quad (4)$$

$$\Delta u = u - u_0 \quad \Delta y = y - y_0 \quad \Delta z = z - z_0$$

Se ha de tener en cuenta que el rango de validez para un modelo linealizado se limita a un entorno del punto de operación ó también llamado punto de linealización.

La modalidad de linealización que aplica el asistente se denomina “linealización por incrementos”. Ésta hace uso de lo que se conoce como modelos en variables de estado. Es una forma de expresar los modelos y su formato es el siguiente:

$$\frac{dx}{dt} = Ax + Bu \quad (5)$$

$$y = Cx + Du$$

Este es el formato que se intentará aplicar al modelo final, donde la variable “x” es lo que se conoce como variables de estado, u son las entradas e “y” son las salidas del modelo. A, B, C y D son las matrices características de todo modelo expresado en espacio de estados.

4.3 DESCRIPCIÓN DEL ASISTENTE

Para usar el asistente de linealización, el usuario debe seguir los siguientes pasos:

- 1) Elegir un modelo EL que contenga el modelo no lineal que desea ser linealizado.
- 2) Generar una partición para ese modelo.
- 3) Iniciar el asistente de linealización: esto puede realizarse siguiendo la secuencia correspondiente en el menú “Tools” de EcosimPro.
- 4) Seleccionar la partición asociada al modelo elegido:

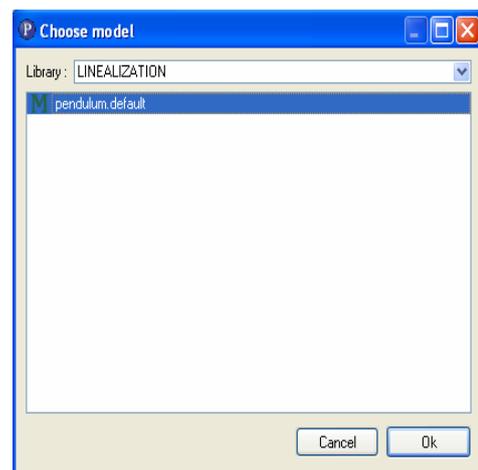


Figura 7: Selección de una partición

- 5) Finalmente el usuario debe seguir los siguientes pasos a través del asistente:

- Selección de las entradas de la linealización
- Selección de las salidas de la linealización
- Selección de los estados de la linealización
- Selección del punto de linealización (punto formado por la

fusión entre las entradas y los estados)

- ...

Se muestra a continuación una de las pantallas del asistente para que pueda verse su apariencia:

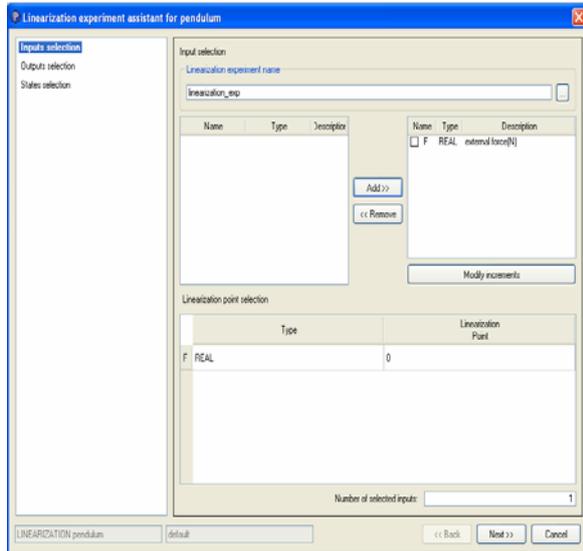


Figura 8: Diálogo del asistente de linealización.

4 CONCLUSIONES

En definitiva lo que se ha conseguido con estos asistentes es *aumentar* significativamente la *potencia* de la herramienta de modelado y simulación **EcosimPro**, la cual a partir de este momento contará con asistentes de optimización, estimación de parámetros y linealización. De este modo EcosimPro aparece en el mercado de este tipo de herramientas de modelado y simulación con mucha más fuerza y siendo la única herramienta de optimización que puede afrontar la resolución de sistemas dinámicos en todo el mercado internacional.

Además, con la herramienta de linealización de modelos se deja abierta una nueva puerta, para seguir aumentado la potencia de EcosimPro, pudiendo comenzar a pensar en usar herramientas de resolución de problemas de *programación mixta entera* como CPLEX (MILP, MILQP), que requieren que los modelos sean entregados a los resolvedores en un determinado formato que está estrechamente relacionado con la expresión de un modelo en espacio de estados y sus matrices características [4].

5. AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo del Ministerio de Educación y Ciencias a través del proyecto de investigación “Desarrollo de herramientas de análisis dinámico, control avanzado y optimización de procesos sobre un entorno de simulación interactivo”, ref. PTR1995-0884-OP-02-02.

Referencias

- [1] Estrategias de Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos, L. Puigjaner, P. Ollero, C. de Prada, L. Jimenez, Edt. Síntesis, 2006
- [2] Optimization of Chemical Processes, T.F. Edgar, D.M. Himmenblau, L.S. Lasdon, McGraw Hill, 2ª edición, 2001
- [3] Practical Methods of Optimization, R. Fletcher, J. Wiley, 2ª edición, 1991
- [4] Non-linear and Mix-Integer Optimization, C. A. Floudas, Edt. Oxford Univ. Press, 1995