Construcción sistemática de modelos grises usando regresión con restricciones

José Luis Pitarch, César de Prada, Antonio Sala, Daniel A. Montes

1

GOBIERNO DE ESPAÑA

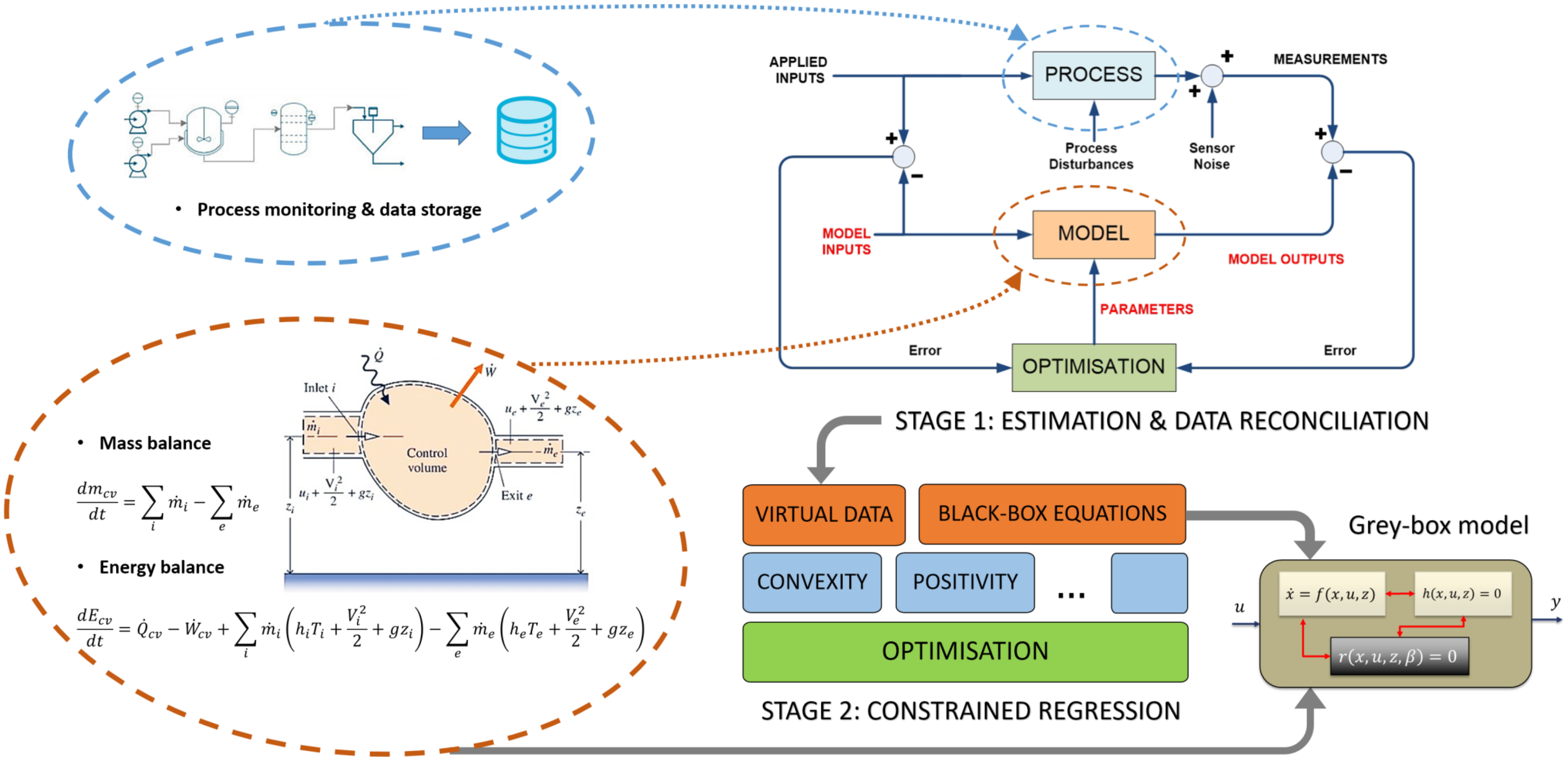
Universidad de Valladolid

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

MOTIVACIÓN Y OBJETIVO

- El modelado es el principal cuello de botella en el desarrollo de herramientas avanzadas de soporte a la decisión.
- Se desea tener modelos de proceso representativos y confiables, pero de complejidad limitada, para su uso en control y optimización en línea.
- En ingeniería de procesos se necesita una métodología que vaya más allá del puro aprendizaje máquina:
  - Incluir tanto conocimiento físico/químico disponible como sea posible.
  - Limitar la elevada dependencia en cuanto a cantidad y calidad de los datos disponibles.
  - Extrapolar coherentemente con la física del proceso.

METODOLOGÍA DE MODELADO HÍBRIDO



REGRESIÓN CON RESTRICCIONES

¿Cualquier aprendizaje máquina sirve para obtener los submodelos de caja negra?

- Es bastante probable que NO:
  - Hay muchos datos históricos pero alrededor del mismo punto de operación.
  - Realizar experimentos en una planta en producción es caro y limitado.
- Búsqueda de **modelos subrogados capaces de extrapolar con coherencia**.
- Opciones para obtener modelos de caja negra con restricciones:

1) ***Regresión simbólica***

Problema MI(N)LP +
muestreo adaptativo

ALAMO
a black-box modeling tool

2) ***Physics-informed NN***

Muestreo representativo
+ leyes físicas conocidas
"Restricciones" de igualdad

3) ***Regresión polinomial SOS***

Problema SDP (convexo)
Restricciones garantizadas
en toda la región de operación

REGRESIÓN SOS (SUM OF SQUARES)

Programación SOS

- Si un polinomio $p(z)$ es SOS, entonces
$$\boldsymbol{p}(\boldsymbol{z}) \geq \mathbf{0}\ \forall \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}$$
- Comprobar $p(z) \geq 0$ localmente en una región $\Omega(z) \coloneqq \{z | g_i(z) > 0\}$ intersección de polinomios es "fácil":
$$p(z) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i(\alpha; z) \cdot g_i\ (z) \geq 0$$
$$\lambda_i(\alpha; z) \geq 0$$

P. Parrilo, 2000. *Structured semidefinite programs and semialgebraic geometry methods in robustness and optimization.* PhD. Thesis, CalTech

M. Putinar, 1993. Positive Polynomials on Compact Semi-algebraic Sets. *Indiana Univerisity Mathematics Journal*, 42(3), 969-984

Regresión por mínimos cuadrados

$$\underset{\beta}{\text{minimizar}} \sum_{i=1}^{N} \left(\mathrm{y}_{[i]} - p(\beta; \mathrm{x}_{[i]})\right)^2$$

$$\text{s.t.}: \boldsymbol{c}(\boldsymbol{\beta}; \boldsymbol{x}) \geq \mathbf{0}\ \forall x \in \Omega \coloneqq \{x | g(x) > 0\}$$
$$\underline{\boldsymbol{\beta}} \leq \beta \leq \overline{\boldsymbol{\beta}}$$

-Restricciones/cotas en el modelo y en sus **derivadas**:

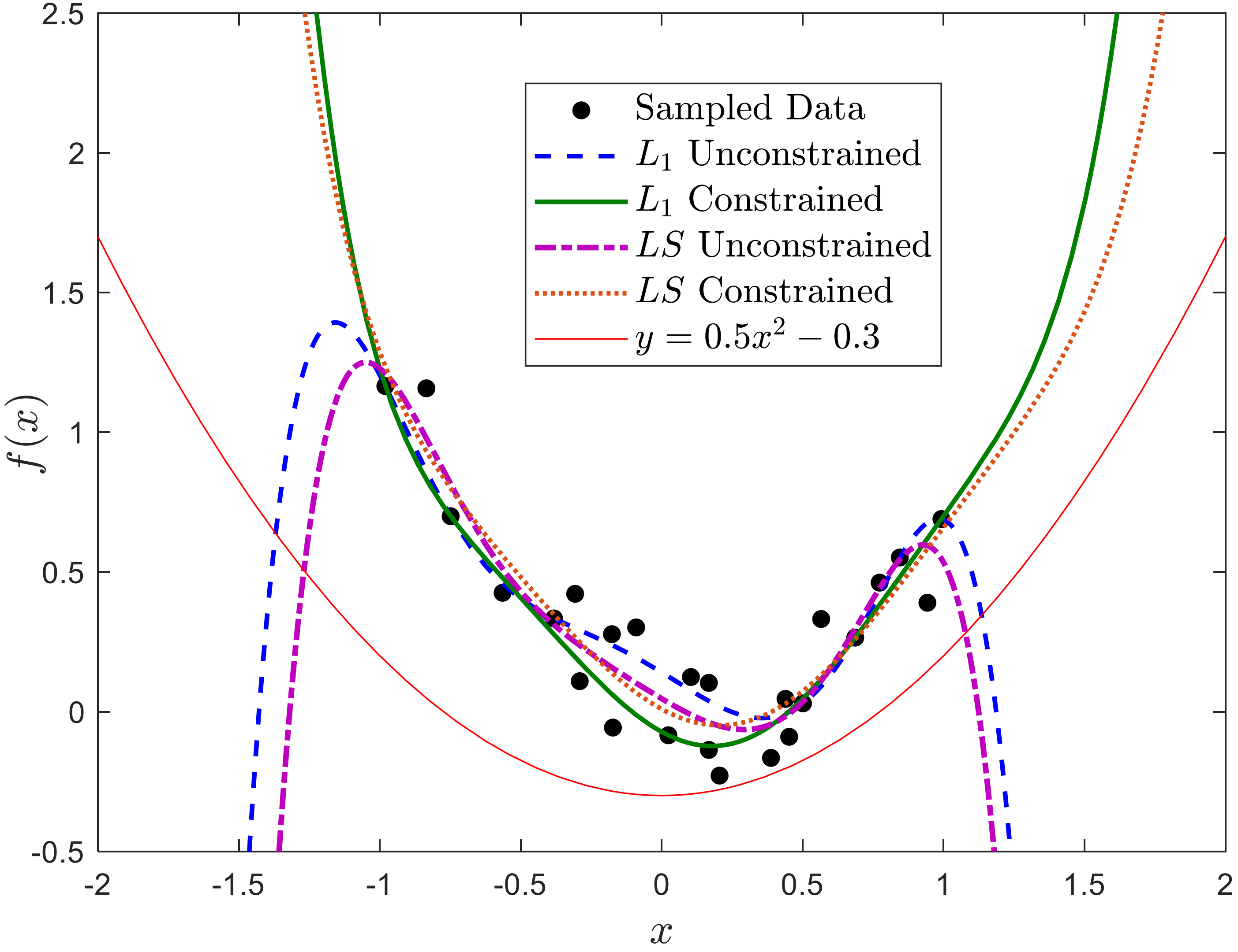
Monotonía $\alpha^T \nabla_x p(\beta; x) \geq \mathrm{F}$

Curvatura $\mathrm{A}^\mathrm{T} \cdot \nabla_x^2 f(\beta; x) \cdot \mathrm{A} > \mathrm{B}$

Convexidad: $H(\beta; x) \succ 0$

…

EJEMPLO ACADÉMICO



- Modelo polinomial de hasta grado 6
- Se desea extrapolar al rango $x \in [-2,2]$

AJUSTE CON NORMAS $\mathcal{L}_1$ Y $\mathcal{L}_2^2$

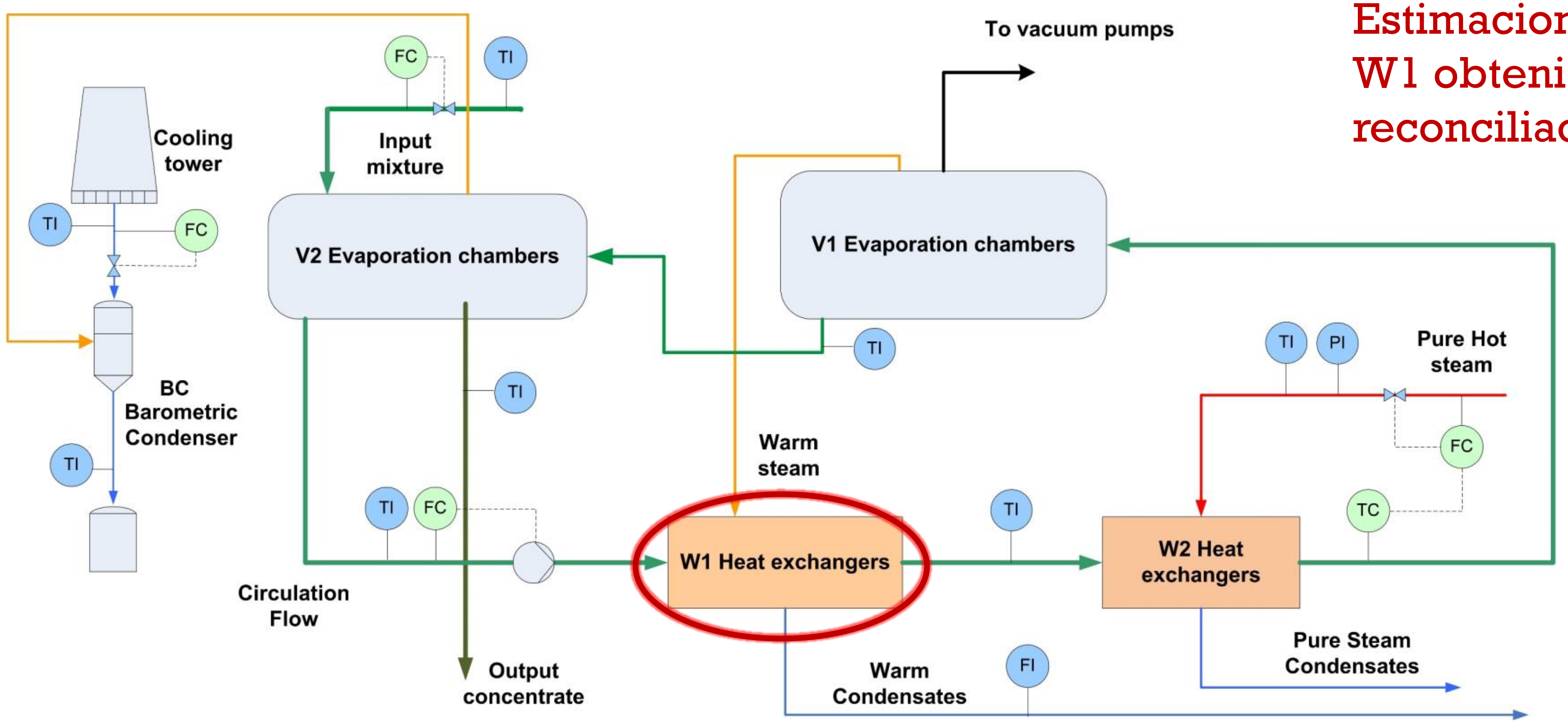
ERRORES DE AJUSTE A DATOS:

	$\mathcal{L}_1$ norm	$\mathcal{L}_2^2$ norm
Unconstrained	**2.703**	**0.431**
Constrained	**2.836**	**0.4765**

CASO INDUSTRIAL

Lenzing
Innovative by nature

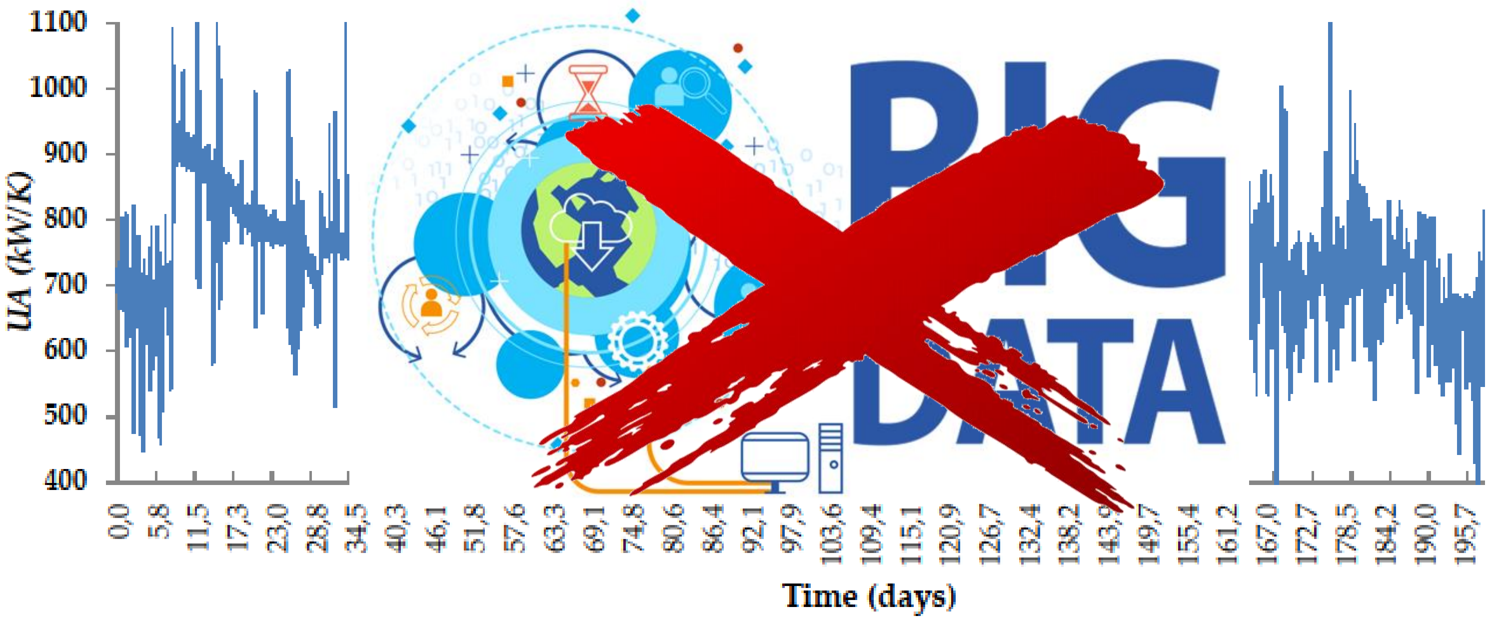
- Modelar el coeficiente global de transmisión de calor UA en una planta de evaporadores:

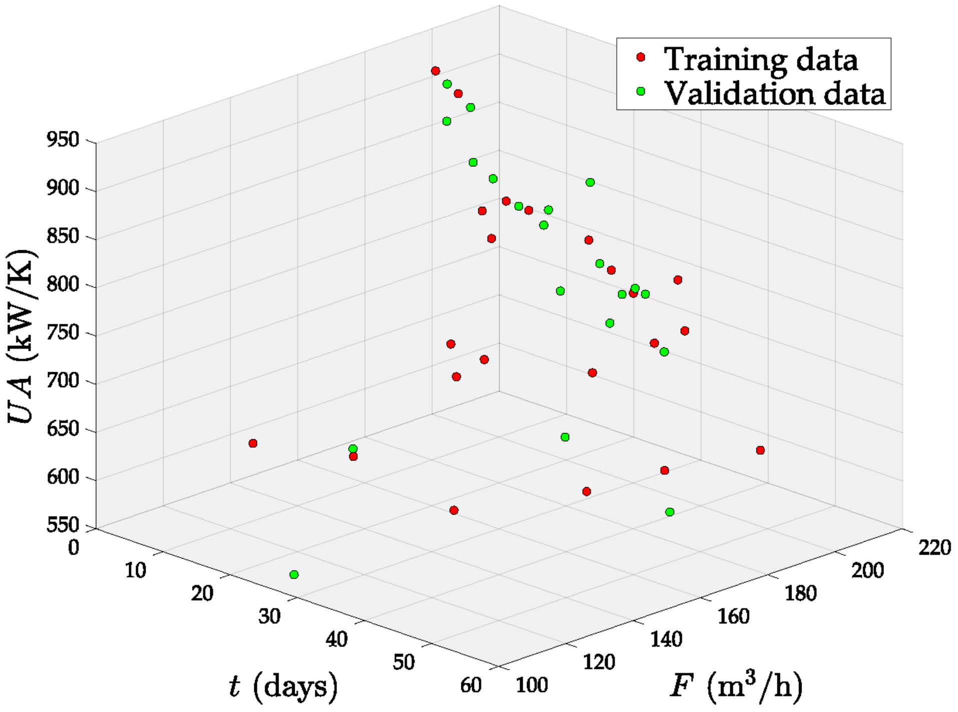


Estimaciones de UA en W1 obtenidas por reconciliación de datos

DATOS DISPONIBLES PARA REGRESIÓN

- Muchas muestras tomadas cada 5 min en 7 meses de operación
- El 98% del tiempo la planta operó con caudales altos





REGRESIÓN CON REGULARIZACIÓN

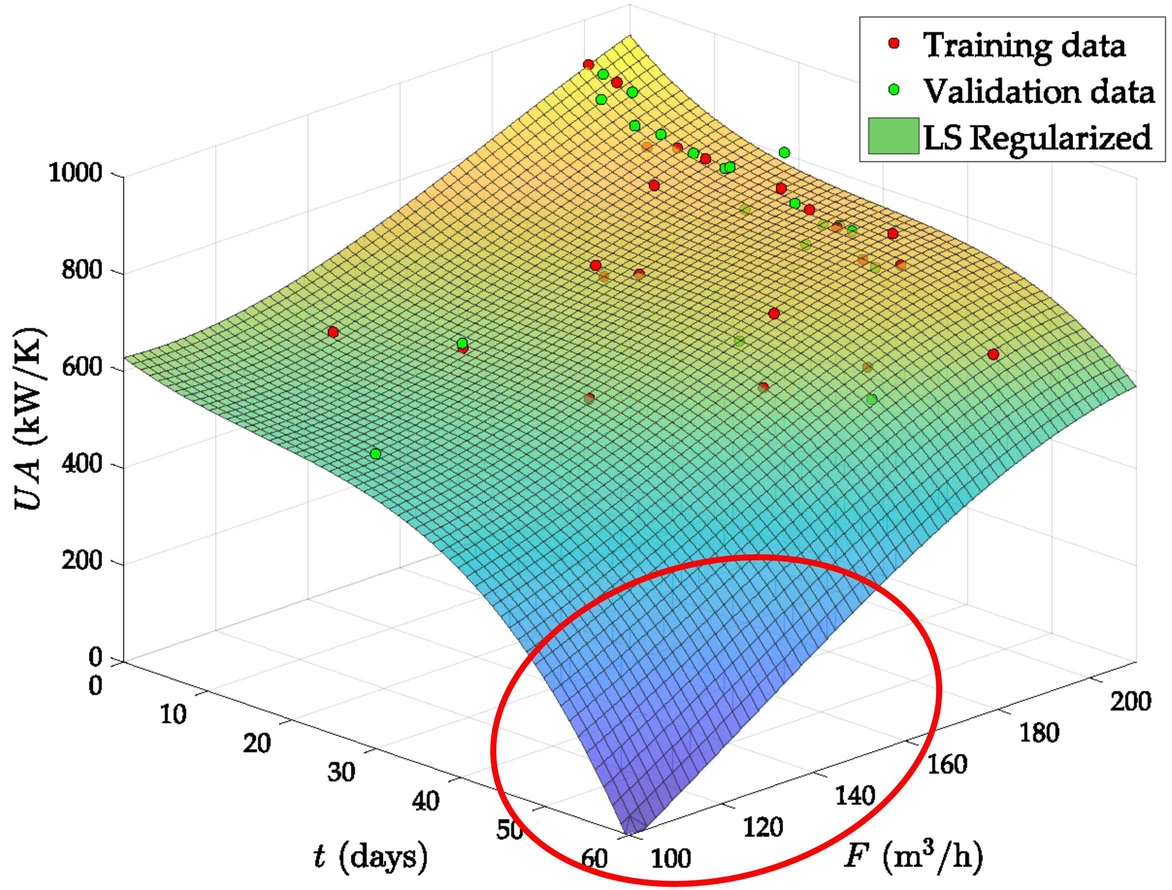
$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^{N} \left(\mathrm{y}_{[\mathrm{i}]} - p(\beta; \mathrm{x}_{[\mathrm{i}]})\right)^2 + \boldsymbol{\Gamma} \cdot \|\boldsymbol{\beta}\|_1$$

$$\text{s.t.:} \quad \underline{\boldsymbol{\beta}} \leq \beta \leq \overline{\boldsymbol{\beta}}$$

- $\boldsymbol{\Gamma = \gamma\left[0, 1, e, e^2, e^3, e^4 \ldots\right]^T}$

  Metaparámetro que progresivamente penaliza el uso de monomios de grado alto.

- Polinomio de grado 4 en F y t



REGRESIÓN SOS CON RESTRICCIONES

- Cotas en las derivadas parciales:

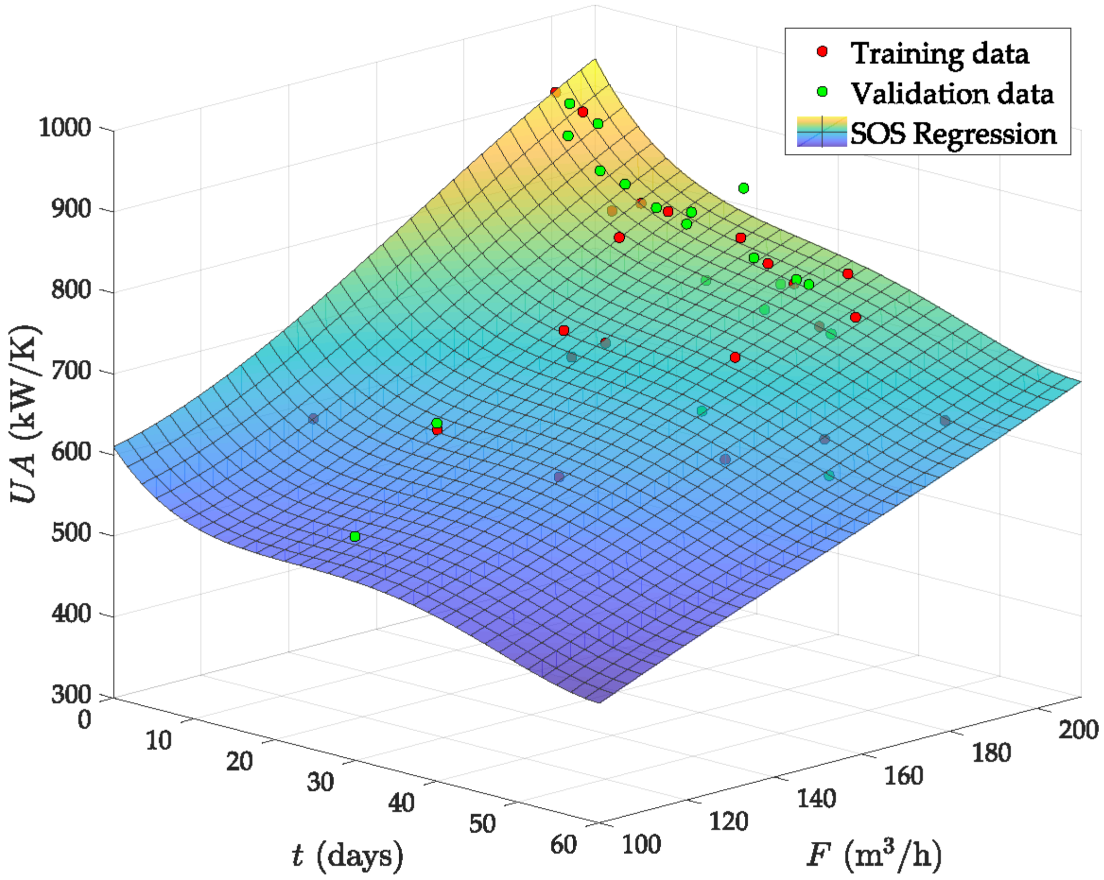
$$\frac{\mathrm{d}p(F,t)}{\mathrm{d}F} > 0\ \forall\ F,t \in \Omega$$

$$\frac{\mathrm{d}p(F,t)}{\mathrm{d}t} < 0\ \forall\ F,t \in \Omega$$

$$\frac{\mathrm{d}p(F,t)}{\mathrm{d}F} < 0{,}6\ \forall\ F,t \in \Omega \cap \{30 < t < 60\}$$

$$\frac{\mathrm{d}p(F,t)}{\mathrm{d}t} > -0{,}6\ \forall\ F,t \in \Omega \cap \{30 < t < 60\}$$

- Mismo grado del polinomio
- El ajuste a datos solo es 1.3% peor



PROGRAMACIÓN

MATLAB®

Paso 1. Reconciliación de datos

CasADi

IPOPT

NLP solver

COIN|OR

COMPUTATIONAL INFRASTRUCTURE FOR OPERATIONS RESEARCH

Paso 2. Regresión SOS

oxfordcontrol/
SOSTOOLS

UNIVERSITY OF OXFORD

sqlp/**sedumi**

CONCLUSIONES

- La metodología de modelado híbrido propuesta **permite incorporar todo el conocimiento disponible** sobre el proceso.
- **Las restricciones SOS se garantizan en cualquier punto** independientemente de los datos disponibles**.**
- **Los modelos de caja negra se obtienen resolviendo un problema de optimización convexa**.
  - El ejemplo del intercambiador de calor tarda ~1,5 sec.
- **La regresión SOS está limitada a formas polinomiales**
- **Escalabilidad limitada** por el número de variables independientes y el grado de los polinomios involucrados**.**
- **No se decide automáticamente el mejor grado de los polinomios** La selección de funciones base requiere programación mixta-entera
- **La interpretabilidad del modelo se diluye para grados altos**

REFERENCIAS

Contacto:
jlpitarch@isa.upv.es

- Developing Grey-box Dynamic Process Models
  C. de Prada, D. Hose, G. Gutierrez, J.L. Pitarch
  IFAC-PapersOnLine 51 (2), pp. 523-528
- A Sum-Of-Squares Constrained Regression Approach for Process Modeling
  J.L. Pitarch, A. Sala, C. de Prada
  IFAC-PapersOnLine 52 (1), pp. 754-759
- Application of SOS-constrained regression to model unknown reaction kinetics
  J.L. Pitarch, D.A. Montes, C. de Prada, A. Sala
  IFAC-PapersOnLine 54 (3), pp. 395-400
- A systematic grey-box modeling methodology via data reconciliation and SOS constrained regression
  J.L. Pitarch, A. Sala, C. de Prada
  Processes 7 (3), 170