

01170
12
2g

Control de tiempo óptimo de un biorreactor
aerobio usando observadores no lineales

Tesis que presenta:

Alejandro Vargas Casillas

para obtener el grado de:
MAESTRO EN INGENIERÍA ELÉCTRICA

Dirigida por:

Dr.-Ing. Jaime A. Moreno Pérez

Enero de 1999

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

270992 -



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Índice General

Dedicatoria	ix
Agradecimientos	xi
Simbología	xiii
1 Introducción	1
1.1 Motivación	1
1.2 Planteamiento del problema	2
1.3 Objetivos	3
1.4 Materiales y métodos	4
1.5 Antecedentes	5
1.6 Aportes del trabajo	6
1.7 Organización del trabajo	6
2 Modelo matemático del proceso	9
2.1 Reactor secuencial en lotes	9
2.2 Modelo matemático empleado	10
2.2.1 Consideraciones previas	12
2.2.2 Fases de llenado y reacción	12
2.2.3 Fase de decantado	15
2.2.4 Fase de vaciado	16
2.2.5 Tiempo muerto	16
2.3 Análisis de estabilidad	16
2.3.1 Estabilidad entrada-estados	17
2.3.2 Puntos de equilibrio	22
2.3.3 Estabilidad de los puntos de equilibrio	23

3	Controlador de tiempo óptimo	27
3.1	Problema de control de tiempo óptimo	27
3.2	Análisis de controlabilidad	29
3.3	Ley de control	31
4	Observadores de estados	35
4.1	Justificación	35
4.2	Análisis de observabilidad	36
4.2.1	Definiciones	37
4.2.2	Análisis de observabilidad del sistema	41
4.3	Diseño de observadores	47
4.3.1	Observadores para sistemas lineales invariantes en el tiempo	48
4.3.2	Observadores para sistemas no lineales	49
4.4	Sumario	58
5	Resultados y discusión	59
5.1	Validación del modelo matemático	59
5.2	Optimalidad del controlador	61
5.3	Comparación de observadores no lineales	62
5.3.1	Observadores en lazo abierto	63
5.3.2	Observadores en lazo cerrado	67
5.3.3	Robustez paramétrica de la estrategia	69
5.4	Implantación experimental	71
5.4.1	Desempeño de la estrategia de control	71
5.4.2	Formación de metabolito	73
5.4.3	Operación continua	75
6	Conclusiones	77
	Bibliografía	79

Índice de Figuras

2.1	Fases de operación de un SBR	11
2.2	Ley de Haldane	14
3.1	Conjunto alcanzable para el problema de control óptimo	32
3.2	Trayectoria óptima para tres condiciones iniciales.	33
5.1	Comparación entre las respuestas de simulación y experimental para las concentraciones de sustrato y oxígeno disuelto. . . .	60
5.2	Evolución de las concentraciones de sustrato y biomasa cuando se usan el controlador óptimo y la estrategia usual con $S_{en} = 175$ [mg/l].	61
5.3	Evolución de las concentraciones de sustrato y biomasa cuando se usan el controlador óptimo y la estrategia usual con $S_{en} = 350$ [mg/l].	62
5.4	Evolución del volumen con el controlador óptimo y la estrategia usual.	63
5.5	Evolución del flujo de entrada cuando se usa el controlador óptimo.	63
5.6	Estimación de S y X con observadores en lazo abierto para tres condiciones iniciales.	65
5.7	Estimación de S y X al aplicar una entrada mala.	67
5.8	Concentraciones de biomasa y sustrato y su estimación usando el EKF en lazo cerrado.	68
5.9	Concentraciones de biomasa y sustrato y su estimación usando el observador de alta ganancia en lazo cerrado.	69
5.10	Estimación de S y X con parámetros diferentes a los nominales.	70
5.11	Concentraciones de sustrato real y estimada en tiempo real: comparación de la estrategia usual tipo SBR y la de tiempo óptimo con observador	72

5.12	Concentraciones de sustrato real y estimada y absorbancia del agua a 380 [nm] cuando la estartegia óptima llena muy lentamente.	74
5.13	Concentraciones de sustrato real y estimada usando la estrategia propuesta en forma continua.	75

Índice de Tablas

5.1	Parámetros del biorreactor	60
5.2	Condiciones iniciales de los observadores:	64
5.3	Parámetros de diseño de los observadores	64
5.4	Parámetros del observador diferentes a los de la planta	70

Con mucho cariño para Blanca.

Gracias por tu ayuda, comprensión, apoyo y amor. Sin ellos, este trabajo (entre otras cosas) nunca se habría realizado.

x

Agradecimientos

- A la UNAM por permitir formarme en sus aulas y ser realmente una segunda casa para mí.
- A la DGAPA por apoyarme con becas generosas para los estudios de Maestría y la realización de esta tesis.
- A mis padres por ser los motores de mi inicio de carrera académica y ser el mejor ejemplo a seguir.
- Al Grupo de Control de la Facultad e Instituto de Ingeniería por su profesionalismo, dedicación y enseñanzas.
- Al grupo de trabajo de Automatización y Bioprocesos dedicados a realizar este gran proyecto, del cual este trabajo sólo es una pequeña parte.
- A mis hermanos, suegros y cuñados, por su apoyo y consejos.
- Al Dr. Jaime Moreno por sus siempre apreciables consejos, su apoyo a mi formación académica y por tener siempre tiempo para dedicarme, siendo siempre un excelente asesor.

Simbología

- X : Concentración de biomasa en el reactor,
- S : Concentración de sustrato en el reactor,
- O : Concentración de oxígeno disuelto en el agua,
- V : Volumen de agua en el reactor,
- $\mu(S)$: Tasa de crecimiento de biomasa específica,
- $\mu'(S)$: Derivada de $\mu(S)$ con respecto a S ,
- Y : Coeficiente de conversión biomasa/sustrato,
- Y_{XO} : Coeficiente de conversión biomasa/oxígeno,
- K_{La} : Coeficiente de transferencia de masa de oxígeno,
- b : Tasa específica de respiración endógena del sustrato,
- K_d : Tasa de mortalidad de biomasa,
- Q_{en} : Flujo de entrada de agua,
- Q_{sal} : Flujo de salida de agua,
- Q_{sing} : Flujo de entrada de agua singular usado en la estrategia de control de tiempo óptimo,
- Q_{max} : Flujo máximo de entrada de agua,
- Q_{max} : Flujo máximo de entrada de agua,
- D_{en} : Tasa de dilución de entrada: $D_{en} = Q_{en}/V$,
- O_{en} : Concentración de oxígeno disuelto en el flujo de entrada,
- O_s : Concentración de saturación de oxígeno,
- K_S : Constante de afinidad,
- K_I : Constante de inhibición,
- μ_0 : Tasa específica máxima de crecimiento,
- μ^* : Valor máximo de $\mu(S)$,
- S^* : Concentración de sustrato con la cual $\mu(S) = \mu^*$,
- V_{max} : Capacidad volumétrica máxima del biorreactor,
- V_{min} : Volumen mínimo de agua aceptable en el biorreactor,

- V_f : Volumen al final de la reacción,
 V_0 : Volumen inicial,
 X_0 : Concentración de biomasa inicial,
 S_0 : Concentración de sustrato inicial,
 O_0 : Concentración de oxígeno disuelto inicial,
 T_r : Duración de las fases de llenado y reacción,
 σ : Variable auxiliar para hallar acotamiento superior de S ,
 z : Variable auxiliar para hallar acotamiento superior de X ,
 C : Variable auxiliar para hallar acotamiento superior de O ,
 C_{en} : Constante auxiliar,
 \mathbf{x} : Vector de estados: $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^4$,
 \mathbf{x}_0 : Vector de estados inicial,
 \mathbf{z} : Vector de estados del subsistema mínimo: $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^4$,
 \mathbf{z}_0 : Vector de estados inicial del subsistema mínimo,
 \mathbf{u} : Vector de entradas al sistema: $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^1$,
 y : Salida del sistema: $y \in \mathbb{R}$,
 $\mathbf{f}(\cdot)$: Función vectorial que representa la dinámica del vector de estado,
 $\mathbf{g}(\cdot)$: Función vectorial que representa la dinámica del estado afín a la entrada,
 $h(\cdot)$: Función escalar de variable vectorial que representa la ecuación de salida,
 n : Número de estados de un sistema dinámico,
 m : Número de entradas a un sistema dinámico,
 p : Número de salidas de un sistema dinámico,
 $\sigma(\mathbf{z}_0)$: Superficie invariante donde se mueven los estados cuando hay conservación de la masa,
 ρ_0 : Constante que define la superficie invariante,
 D : Dominio de definición donde se ubican los estados del sistema: $D \subset \mathbb{R}^4$,
 D_A : Región donde se considera admisible una trayectoria del sistema: $D_A \subset \mathbb{R}^4$,
 Ξ_f : Región donde de la reacción: $\Xi_f \subset \mathbb{R}^4$,
 Ω_A : Región donde se considera admisible una trayectoria del subsistema mínimo: $\Omega_A \subset \mathbb{R}^3$,
 \mathbf{Z}_f : Región donde se desea que se encuentre el estado final del subsistema mínimo: $\mathbf{Z}_f \subset \mathbb{R}^3$,

- \mathcal{V} : Función de Lyapunov,
- $\dot{\mathcal{V}}$: Derivada temporal de la función de Lyapunov,
- J : Funcional de costo a minimizar con el control óptimo,
- F : Matriz de $n \times n$ empleada en la linealización del sistema,
- G : Matriz de $n \times m$ empleada en la linealización del sistema,
- H : Matriz de $p \times n$ empleada en la linealización del sistema,
- \mathcal{O} : Matriz de observabilidad del sistema linealizado,
- $\bar{\mathcal{O}}$: Espacio de observación de un sistema no lineal,
- $\rho[\cdot]$: Rango de una matriz,
- $\lambda[\cdot]$: Conjunto de valores propios de una matriz,
- e : Error de observación,
- K : (a) Matriz de corrección de la dinámica del observador,
(b) Matriz de coeficientes de conversión de $n \times m$,
- $K^*(\theta)$: Matriz K para el observador de alta ganancia,
- P : Matriz de covarianza del error,
- Q : Matriz de covarianza del ruido en los estados,
- R : Matriz de covarianza del ruido en las salidas,
- θ : Coeficiente de ajuste de alta ganancia,
- ξ : Vector de componentes involucrados en la reacción,
- \mathbf{F} : Vector de flujos másicos de entrada,
- \mathbf{Q} : Vector de flujos másicos de salida en forma gaseosa,
- $\phi(\xi)$: Vector de tasas de crecimiento.

Capítulo 1

Introducción

1.1 Motivación

El agua, alguna vez considerada un recurso renovable, es cada vez más escasa. El desmedido crecimiento poblacional y diversas actividades humanas han obligado a procurar ya no desperdiciarla y cuidar los cuerpos de agua naturales de donde se obtiene. Las aguas desechadas en algunos procesos industriales pueden contener sustancias tóxicas que si fueran descargadas directamente a la naturaleza dañarían o alterarían significativamente los ecosistemas. Ante esta problemática, la industria se ha visto obligada a tratar las aguas residuales para eliminar sustancias contaminantes. Así, el agua puede ser descargada sin ocasionar problemas ecológicos, o bien ser sometida a un tratamiento posterior que permita reutilizarla.

Para tratar aguas residuales con sustancias tóxicas se pueden usar métodos biológicos, donde la degradación es llevada a cabo por microorganismos especializados. Otros métodos de tratamiento incluyen algunos de índole física o fisicoquímica, tales como la filtración o la adsorción en carbón activado. La ventaja de los métodos biológicos con respecto a los otros radica en que la sustancia no es simplemente trasladada a otro medio, sino que efectivamente es mineralizada por los microorganismos en sustancias inocuas y transformada en materia celular.

Una manera de llevar a cabo un tratamiento biológico de aguas residuales es mediante el uso de biorreactores. Si además esta degradación es llevada a cabo por microorganismos que requieren oxígeno para realizar los procesos metabólicos, se trata entonces de biorreactores aerobios. Una forma de operar

reactores de este tipo es haciéndolo un *reactor secuencial en lotes* (SBR, por sus siglas en inglés). Este tipo de operación ha demostrado su efectividad en la degradación de sustancias tóxicas xenobióticas¹ [5].

Un biorreactor de tipo SBR usualmente opera en fases bien definidas en el tiempo, cuya duración generalmente es decidida por un experto (operador) con base en su experiencia, a partir de las características particulares del reactor (tamaño, capacidad, tipo y distribución del aireador, tamaño de los flocúlos, características del sustrato, concentraciones en el influente, etc.). Sin embargo, para cierto tipo de sustancias tóxicas, la dinámica de la degradación puede acelerarse u optimizarse con una operación adecuada del reactor. Una forma de lograrlo es diseñando un *controlador de tiempo óptimo* que minimice el tiempo de degradación. Esto consituye el objetivo general en el que está enmarcado este trabajo.

1.2 Planteamiento del problema

Existen diversos problemas asociados con la implantación de una ley de control de tiempo óptimo en un biorreactor de tipo SBR. En primer lugar, se requiere un modelo matemático del sistema que estructuralmente describa el proceso adecuadamente; es decir, la dinámica de las variables que se deciden como estados del sistema debe concordar con lo que sucede en realidad. En segundo lugar, las leyes de control óptimo requieren en general de la medición del vector de estados completo para poder ser implantadas. Finalmente, los parámetros del modelo matemático empleado deben ser conocidos.

La situación real es distinta. Por una parte, los sistemas biológicos son muy difíciles de modelar, ya que las variables involucradas pueden ser demasiadas y las relaciones entre ellas pueden ser muy complejas. Por ejemplo, en el biorreactor aerobio estudiado, para realizar la degradación de las sustancias tóxicas se emplea un consorcio de microorganismos, el cual está compuesto, no sólo por diferentes géneros y especies, sino también por individuos que realizan, cada uno, reacciones bioquímicas difíciles de modelar. Por otro lado, aún simplificando el modelo matemático, en la práctica los estados resultantes no son medibles en línea, ya sea porque los instrumentos de medición son demasiado costosos o porque las únicas técnicas de medición, si existen, son demasiado tardadas o imposibles de implantar en un proceso automatiza-

¹Se dice xenobiótica a aquella sustancia que por no estar presente naturalmente en el medio ambiente, es de difícil degradación por métodos biológicos.

do (e.g. pruebas de laboratorio que necesariamente involucran un operador). Aún con un modelo simplificado y manejable, los parámetros involucrados además resultan difíciles de identificar y, dada la naturaleza biológica del reactor, variantes en el tiempo.

Una posible solución a la problemática anterior consiste primeramente en usar un modelo matemático lo suficientemente sencillo para ser manejable (e.g. un número limitado de estados y descrito por ecuaciones diferenciales ordinarias), pero lo suficientemente completo para describir adecuadamente el proceso. Se considera que este modelo sólo tiene incertidumbre paramétrica, y no incertidumbre en cuanto a la estructura. Después se diseña una *ley de control de tiempo óptimo* usando este modelo y se busca robustificarla ante la incertidumbre paramétrica. Para solucionar el problema de la difícil o imposible medición del vector de estados completo se diseña un *observador de estados*, el cual además debe ser robusto ante la incertidumbre en los parámetros. Evidentemente entonces ya no puede garantizarse la optimalidad de la ley de control, pero si los estados estimados convergen suficientemente rápido a los reales, entonces el conjunto observador-controlador puede resultar aceptable para disminuir el tiempo de reacción. Posteriormente, para identificar los parámetros nominales del modelo empleado y compensar su variabilidad temporal se diseña un *identificador de parámetros*. En cada uno de los pasos anteriores se deben buscar y demostrar propiedades que garanticen el adecuado funcionamiento del conjunto planta-controlador-observador-estimador de parámetros. Finalmente se debe probar esta estrategia experimentalmente.

1.3 Objetivos

En este trabajo no se pretende realizar completamente todo el procedimiento de solución expuesto, dada la complejidad de ello. Un modelo matemático sencillo ya ha sido propuesto [23] y con base en él ya se ha propuesto un controlador de tiempo óptimo [19]. Para los propósitos de este trabajo, únicamente se busca cumplir los siguientes objetivos:

Objetivo 1. Validar experimentalmente el modelo matemático.

Objetivo 2. Hacer un análisis de observabilidad del sistema.

Objetivo 3. Diseñar un observador de estados para estimar los estados no medibles e introducirlo al lazo de control.

Objetivo 4. Probar la estrategia de control óptimo con observador, tanto en simulación, como experimentalmente.

1.4 Materiales y métodos

El caso particular estudiado es un biorreactor piloto de 7 litros que se emplea para el tratamiento de aguas sintéticas con altas concentraciones de compuestos fenólicos, intercambiando un volumen de 4 litros por ciclo. El modelo empleado usa cuatro estados, es no lineal, de parámetros concentrados y se considera invariante en el tiempo. Los cuatro estados corresponden al volumen de agua y las concentraciones de microorganismos, sustrato y oxígeno disuelto en el reactor. El flujo de entrada de agua residual es la única entrada y se considera la variable de control para el controlador. De los estados, se consideran medibles el oxígeno disuelto y el volumen. La simulación y el diseño del observador se hace usando MATLAB con SIMULINK. La implantación del controlador se hace mediante una tarjeta de adquisición de datos DSPACE y los programas de visualización y control de datos COCKPIT y TRACE. Para validar experimentalmente, tanto el modelo matemático, como la operación de la estrategia propuesta, se comparan los resultados de simulación con datos obtenidos mediante otras técnicas de medición fuera de línea

La metodología que se pretende seguir para alcanzar los objetivos presentados es la siguiente:

1. Validar la estructura del modelo matemático comparando los resultados teóricos de simulación con aquellos obtenidos experimentalmente. Con estos últimos ajustar los parámetros del modelo para que las respuestas sean similares.
2. Analizar el modelo matemático del sistema para buscar propiedades de estabilidad, controlabilidad y observabilidad.
3. Revisar la literatura referente al tema de observadores para sistemas no lineales y escoger algunas técnicas de diseño que le sean aplicables.
4. Evaluar las técnicas de diseño de observadores escogidas mediante simulaciones en computadora, tanto con el observador en lazo abierto (el controlador óptimo usa los estados "reales"), como en lazo cerrado (usa los estados estimados).

5. Escoger uno de los observadores evaluados e implantar el controlador para ser usado con el biorreactor piloto de laboratorio.
6. Operar el biorreactor como SBR usando el observador en lazo abierto para estimar los estados no medibles en línea. Comparar los resultados con los valores obtenidos mediante pruebas de laboratorio y ajustar el observador hasta obtener resultados similares.
7. Usar la estrategia propuesta de control óptimo con observador de estados para realizar las fases de llenado y reacción. Comparar los tiempos obtenidos con los que se usan normalmente en la operación de tipo SBR para el mismo biorreactor. Evaluar si efectivamente se reduce el tiempo de degradación de sustrato mediante pruebas de laboratorio conjuntas.

1.5 Antecedentes

El problema de control de biorreactores aerobios continuos o de lecho fijo en el tratamiento de aguas residuales ya ha sido ampliamente estudiado [2, 23]. En cambio, el uso de SBRs para este mismo propósito no es tan común en la práctica y son pocos los trabajos que tratan acerca de su automatización. Muchos de los controladores para bioprocesos reportados en la literatura o usados en la práctica son en realidad *reguladores* para ciertas variables del proceso, tales como las concentraciones de sustrato, biomasa u oxígeno, la temperatura o el pH [2]. El controlador de tiempo óptimo que se usa en este trabajo es el propuesto por Moreno y Buitrón [20] para un biorreactor aerobio de tipo SBR.

El tema de observadores para sistemas no lineales ha sido tratado por diversos autores. A diferencia de los sistemas lineales, no existe una metodología unificante para el diseño de observadores (véase [16, 26, 22] para una comparación entre distintas técnicas de diseño). El observador más sencillo para sistemas no lineales se basa en una linealización de Taylor alrededor de un punto de operación [15]. Si se tienen varios puntos de operación se puede emplear un observador basado en técnicas de linealización extendida [3, 16]. Si la linealización se hace alrededor de una trayectoria, se puede extender el diseño de observadores lineales usuales a sistemas no lineales, como en el observador de Luenberger extendido y/o el filtro de Kalman extendido [11, 28]. Otra estrategia consiste en hacer una transformación de coordenadas para llevar el sistema original a una forma normal o canónica en la cual se diseña

el observador; posteriormente se regresa a las coordenadas originales [22, 10]. Para sistemas con una parte lineal, se pueden aprovechar ciertas propiedades de la no linealidad para diseñar observadores robustos cuya convergencia se garantiza a pesar de la no linealidad. Algunos observadores de este tipo son: el observador basado en técnicas para sistemas de estructura variable (modos deslizantes) propuesto por Walcott y Żak [27], el observador independiente de las entradas propuesto por Besançon y Hammouri [4] y el observador propuesto por Thau [25]. Existen además observadores de tipo *dead-beat* para sistemas no lineales discretos [17] e incluso propuestas de observadores específicos para biorreactores [2]. Como se puede ver, no todos los observadores son aplicables a todos los sistemas no lineales; su aplicabilidad depende de cada caso en particular.

1.6 Aportes del trabajo

Este trabajo contribuye al conocimiento con los siguientes aportes:

1. Se valida el modelo matemático para un biorreactor aerobio empleado en el tratamiento de aguas residuales.
2. Se analiza la observabilidad del sistema y se muestra que ninguno de los observadores revisados en la literatura hasta el momento es estrictamente aplicable al biorreactor estudiado.
3. Se implanta experimentalmente, en un biorreactor piloto, la estrategia de control de tiempo óptimo propuesta por Moreno y Buitrón [20] usando un observador no lineal para estimar los estados no medibles.
4. Se comprueba experimentalmente que el controlador de tiempo óptimo efectivamente reduce el tiempo de reacción en un biorreactor de tipo SBR.

1.7 Organización del trabajo

En este primer capítulo se describió el problema que se pretende resolver, se presentaron los objetivos de este trabajo y se expuso la metodología a seguir para cumplirlos. En el siguiente capítulo se plantea y explica el modelo matemático del proceso bajo ciertas suposiciones y se hace un análisis de

estabilidad de la planta. En el tercer capítulo se hace un análisis de controlabilidad, se expone el controlador de tiempo óptimo empleado y se analizan las propiedades del sistema en lazo cerrado con esta ley de control. El cuarto capítulo, referente a la búsqueda de observadores no lineales para el proceso, primero presenta algunas definiciones útiles para después hacer un análisis de observabilidad del sistema. Posteriormente se analizan cuatro estrategias de diseño de observadores no lineales y su aplicabilidad al sistema estudiado. En el quinto capítulo se presentan y discuten algunos resultados de simulación usando MATLAB y SIMULINK para tres observadores y el controlador de tiempo óptimo, tanto en lazo abierto como cerrado, así como los resultados experimentales obtenidos hasta el momento. Finalmente, en el último capítulo se presentan las conclusiones de este trabajo.

Capítulo 2

Modelo matemático del proceso

Para poder automatizar al reactor secuencial por lotes, se debe contar con una descripción matemática del mismo. Es decir, se requiere un modelo matemático al cual se le puedan hallar propiedades y con base en ellas diseñar un *controlador* para el proceso. En este capítulo se describe la operación de un biorreactor como SBR y se expone el modelo matemático empleado para describir el proceso. Posteriormente se hace un análisis de estabilidad entrada-salida y de los puntos de equilibrio.

2.1 Reactor secuencial en lotes (SBR)

Los biorreactores que operan bajo un esquema de reactor secuencial en lotes (SBR por sus siglas en inglés: *Sequencing Batch Reactor*) son biorreactores aerobios donde un consorcio de microorganismos suspendidos en el agua a tratar, también llamados *lodos activados*, llevan a cabo la degradación del sustrato. Operan normalmente en fases bien definidas en el tiempo y de manera cíclica [23].

Las fases que definen un proceso de tipo SBR son las siguientes (véase la figura 2.1):

Fase de llenado El reactor inicialmente se encuentra con un volumen mínimo de agua y biomasa altamente concentrada; un aireador debe estar funcionando para asegurar que los microorganismos obtengan oxígeno necesario para su supervivencia. Durante esta fase se alimenta el reactor con agua residual no tratada o pretratada hasta que el reactor se llene a su capacidad máxima. También se pone en funcionamiento un

mezclador que hace la mezcla uniforme y permite que los lodos continúen en suspensión durante la siguiente fase.

Fase de reacción Una vez lleno el reactor se continua mezclando y aireando la suspensión de lodos activados hasta que la biomasa haya degradado todo el contaminante o sustrato. El tiempo que dura esta fase depende de cada caso en particular y por lo general es determinado por un experto con base en su experiencia previa y/o mediciones fuera de línea, que involucran pruebas de laboratorio.

Fase de decantado Cuando el agua ya ha sido tratada, se apagan el aireador y el mezclador para permitir que los lodos se decanten. El tiempo de decantado también depende de las condiciones específicas del reactor (e.g. la altura) y del tipo de lodos que se empleen (e.g. el tamaño de los flocúlos).

Fase de vaciado Estando los lodos decantados, el agua tratada que queda en la parte superior (sobrenadante) puede ser removida sin dificultad. Ésta puede ser posteriormente descargada a un cuerpo de agua o enviada a otra planta para un tratamiento posterior.

Tiempo muerto Debido a que un reactor puede ser parte de un banco de reactores que operan en paralelo o bien, que la carga de agua a tratar sea tan pequeña que no amerite iniciar otro ciclo, se debe también considerar un tiempo muerto antes de repetir la operación. Durante este tiempo generalmente los lodos deben ser aireados para permitir a los microorganismos respirar, aunque se mantengan en ayuno. También en esta fase puede ocurrir que por la muerte natural de los microorganismos, deba considerarse una purga de la biomasa vieja para sustituirla por biomasa nueva.

2.2 Modelo matemático empleado

Por ser este proceso de tipo biológico, con reacciones bioquímicas complejas, encontrar un modelo matemático que lo describa perfectamente es una labor casi imposible. Sin embargo, bajo algunas simplificaciones y suposiciones, sí es posible proponer un modelo que describa aproximadamente esta dinámica tan compleja.

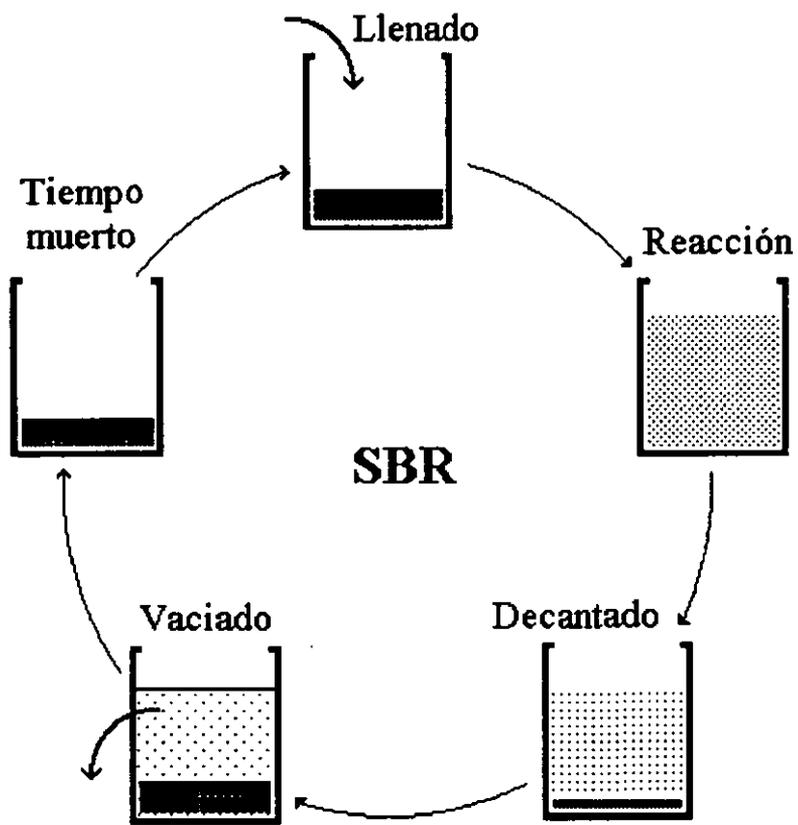


Figura 2.1: Fases de operación de un SBR

2.2.1 Consideraciones previas

Las suposiciones y simplificaciones que se emplean para hallar un modelo matemático del biorreactor son las siguientes:

- i. A pesar de que los lodos activados son en realidad un consorcio de microorganismos con comportamientos específicos e individuales distintos, se consideran como una biomasa homogénea, con mismas tasas de crecimiento y mortalidad.
- ii. Se considera que el reactor está perfectamente mezclado durante las etapas en que el agitador y el aireador están encendidos.
- iii. Aún cuando en una planta real, ya sea industrial o municipal, tanto el número de sustancias a degradar como sus concentraciones son variables, en este modelo se considera que el sustrato se comporta como una única sustancia. También se considera que la concentración de sustrato en el influente es constante y conocida.
- iv. Se supone que el oxígeno disuelto en el reactor siempre es suficiente para que los microorganismos puedan respirar adecuadamente, de tal manera que la tasa de crecimiento de microorganismos no dependa de esta variable.

Con base en estas suposiciones y otras adicionales que se detallarán en su momento, se pueden proponer modelos matemáticos para cada etapa de operación del SBR. En todos los casos se consideran cuatro estados V , X , S y O que corresponden al volumen y las concentraciones de biomasa, sustrato y oxígeno disuelto en el agua, respectivamente. Cabe notar que el modelo correspondiente a las fases de llenado y reacción se usa para diseñar la ley de control y se busca que describa adecuadamente la situación física real. Los otros modelos sólo se emplean para simulación y sólo describen burdamente la realidad física.

2.2.2 Fases de llenado y reacción

Las fases de *llenado* y *reacción* se pueden describir con las siguientes ecuaciones diferenciales, considerando las suposiciones anteriores y haciendo un balance de masas en el reactor [13, 24]:

$$\dot{X} = \mu(S)X - K_d X - X \frac{Q_{en}}{V} \quad (2.1)$$

$$\dot{S} = -\frac{1}{Y} \mu(S)X + (S_{en} - S) \frac{Q_{en}}{V} \quad (2.2)$$

$$\dot{O} = -\frac{1}{Y_{XO}} \mu(S)X + (O_{en} - O) \frac{Q_{en}}{V} + K_{la}(O_s - O) - bX \quad (2.3)$$

$$\dot{V} = Q_{en} \quad (2.4)$$

donde,

- X : Concentración de biomasa en el reactor,
- S : Concentración de sustrato en el reactor,
- O : Concentración de oxígeno disuelto en el agua,
- V : Volumen de agua en el reactor,
- $\mu(S)$: Tasa de crecimiento de biomasa específica,
- Y : Coeficiente de conversión biomasa/sustrato,
- Y_{XO} : Coeficiente de conversión biomasa/oxígeno,
- K_{la} : Coeficiente de transferencia de masa de oxígeno,
- b : Tasa específica de respiración endógena del sustrato,
- K_d : Tasa de mortalidad de biomasa,
- Q_{en} : Flujo de entrada de agua,
- S_{en} : Concentración de sustrato en el flujo de entrada,
- O_{en} : Concentración de oxígeno disuelto en el flujo de entrada,
- O_s : Concentración de saturación de oxígeno.

Naturalmente se satisfacen las siguientes restricciones: $X \geq 0$, $S \geq 0$, $O \geq 0$, $V \geq 0$ y $Q_{en} \geq 0$. Además los parámetros son todos no negativos.

Debido a la suposición de que siempre hay suficiente oxígeno disuelto en el reactor, la tasa de crecimiento de biomasa μ se considera dependiente únicamente de la concentración de sustrato. Evidentemente, si no hay sustrato, la cantidad biomasa no puede aumentar, pues no hay "alimento" que consumir. Además, debido a que el sustrato considerado en este trabajo es una sustancia xenobiótica, éste resulta tóxico cuando su concentración es suficientemente alta. Lo anterior implica que la curva que describe la tasa de crecimiento de biomasa en función de la concentración de sustrato debe poseer las siguientes características:

- i. $\mu(S) = 0$ cuando $S = 0$: no hay crecimiento si no hay sustrato;

- ii. $\mu(S) > 0; \forall S \geq 0$: la tasa de crecimiento es no negativa;
- iii. $\lim_{S \rightarrow \infty} \mu(S) = 0$: a concentraciones altas inhibe el crecimiento de biomasa;
- iv. S^* es la concentración de sustrato tal que la tasa de crecimiento es máxima: $\mu(S^*) = \mu^*$.

Un modelo que cumple con las características anteriores es la ley de Haldane (ver figura 2.2), la cual es frecuentemente usada para este tipo de sustancias [2, 5, 23]. La ecuación que la describe es la siguiente:

$$\mu(S) = \frac{\mu_0 S}{K_S + S + S^2/K_I} \quad (2.5)$$

donde,

- K_S : Constante de afinidad,
- K_I : Constante de inhibición,
- μ_0 : Tasa específica máxima de crecimiento.

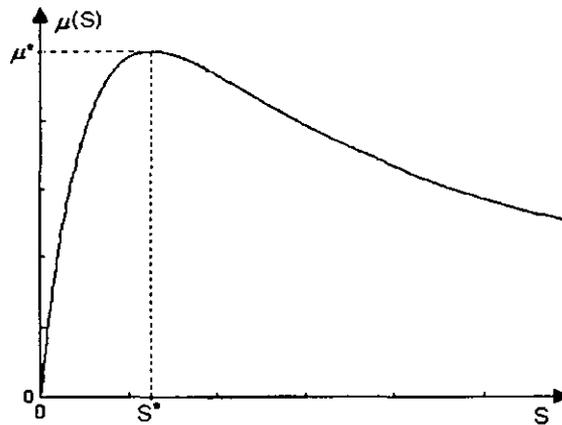


Figura 2.2: Ley de Haldane

Es fácil verificar que el punto donde $\mu(S)$ es máxima queda descrito por:

$$\mu^* = \frac{\mu_0}{1 + 2\sqrt{\frac{K_S}{K_I}}}, \quad S^* = \sqrt{K_S K_I} \quad (2.6)$$

2.2.3 Fase de decantado

Durante la fase de decantado el aireador y el agitador se apagan, por lo cual no puede considerarse que el reactor esté perfectamente mezclado. Un modelo realista del proceso requeriría el uso de ecuaciones en derivadas parciales para describir las concentraciones en cada punto del reactor. Dado que este modelo sólo se usa en las simulaciones, puede usarse una aproximación en parámetros concentrados que describe la dinámica de los estados anteriores considerando al reactor globalmente; es decir, definiendo las concentraciones de sustancia como la masa total dividida entre el volumen total. Se hacen las siguientes suposiciones:

- i. El flujo de entrada es cero: $Q_{en} = 0$;
- ii. El decantado no inicia sino hasta que el sustrato ha sido degradado:
 $S \approx 0 \implies \mu(S) \approx 0$;
- iii. Cuando el aireador está apagado no hay transporte de masa de oxígeno:
 $K_1 a = 0$;
- iv. No hay mortalidad de microorganismos: $K_d = 0$.

Bajo estas suposiciones el modelo matemático (2.1-2.4) queda descrito por:

$$\dot{X} = 0; \quad \dot{S} = 0; \quad \dot{V} = 0; \quad \dot{O} = -bX \quad (2.7)$$

La única concentración que cambia es la del oxígeno disuelto, debido a la tasa de respiración endógena. La tasa de respiración b se ha considerado constante, pero esto sólo es válido cuando la concentración de oxígeno es alta. Si es baja, la ecuación (2.7) derecha podría producir concentraciones negativas de oxígeno, lo cual no concuerda con la realidad. Para evitar este problema se puede suponer que b depende de la concentración de oxígeno disuelto, de tal manera que $b \rightarrow 0$ cuando $O \rightarrow 0$. Esto último es lógico si se piensa que si no hay oxígeno, los microorganismos no pueden respirar y por la tanto la tasa de respiración debe ser cero. En el modelo empleado en esta fase la dependencia está dada por:

$$b(O) = \frac{bO}{K_O + O}, \quad (2.8)$$

donde K_O es la concentración de oxígeno tal que $b(K_O) = b/2$, siendo b la tasa máxima de respiración endógena. Nótese que si K_O es suficientemente pequeña, para $O \gg K_O$, se tiene que $b(O) \approx b$.

2.2.4 Fase de vaciado

Durante el vaciado también el aireador y el agitador se encuentran apagados, no hay flujo de entrada ($Q_{en} = 0$) y se supone que el sustrato ya ha sido degradado. Por lo tanto se puede suponer que $K_{la} = 0$ y $\mu(S) = 0$. El reactor se puede ver como separado en dos partes: en el fondo se concentra toda la biomasa y en la parte superior sólo hay agua sin sustrato y sin biomasa (el sobrenadante). De la misma manera que para la fase anterior, se puede considerar al reactor globalmente y entonces conforme se retira el sobrenadante con un flujo de salida Q_{sal} , el volumen disminuye hasta llegar al volumen mínimo. Sólo la concentración global de biomasa aumenta, ya que no se retira masa de microorganismos. Si además se supone que la concentración de oxígeno es baja y no cambia, el modelo resultante es el siguiente:

$$\dot{X} = X \frac{Q_{sal}}{V}; \quad \dot{S} = 0; \quad \dot{O} = 0; \quad \dot{V} = -Q_{sal}. \quad (2.9)$$

2.2.5 Tiempo muerto

Durante el tiempo muerto se vuelve a encender el aireador ($K_{la} > 0$) y posiblemente también el agitador. Nuevamente se puede suponer que el reactor está perfectamente mezclado y que las concentraciones en cualquier punto son iguales. También es válido suponer que $S = 0$. El modelo matemático que describe esta fase es entonces:

$$\begin{aligned} \dot{X} &= -K_d X \\ \dot{S} &= 0 \\ \dot{O} &= K_{la}(O_s - O) - bX \\ \dot{V} &= 0 \end{aligned} \quad (2.10)$$

2.3 Análisis de estabilidad

En esta sección se analiza la estabilidad del sistema durante las fases de llenado y reacción, que es cuando interesa controlar al sistema. Primero se verifica que con una fuerte suposición con respecto a la variable de control Q_{en} y estando ésta acotada, los estados del sistema permanecen acotados. Posteriormente se analizan los puntos de equilibrio del sistema y su estabilidad en el sentido de Lyapunov.

2.3.1 Estabilidad entrada-estados

La estabilidad entrada-estados asegura que bajo cualquier entrada acotada los estados de un sistema permanecen acotados. En este sentido el biorreactor estudiado no la posee, ya que el volumen puede no estar acotado para cualquier Q_{en} acotada (véase que la ecuación (2.4) define un integrador). Sin embargo, la función de entrada se puede limitar para no sobrepasar la capacidad volumétrica máxima del reactor y ser acorde con la realidad. Esto es:

$$\int_0^{T_r} Q_{en}(\tau) d\tau = V_f - V_0 \geq 0, \quad (2.11)$$

donde V_f es el volumen de agua al final de la reacción, $V_0 > 0$ es el volumen de agua al inicio de la fase de llenado y T_r es el tiempo que duran las fases de llenado y reacción. El volumen final debe ser positivo y menor al máximo permisible en el biorreactor: $0 < V_f \leq V_{max}$. Evidentemente entonces, si $\int_0^{T_r} Q_{en}(\tau) d\tau$ está acotado, $V(t)$ está acotado.

Para demostrar el acotamiento de los demás estados dada la restricción (2.11), primero se demostrará que X y S son no negativos y luego que tienen cotas superiores, las cuales se hallarán. Con base en estos resultados y una suposición adicional se demostrará que O es no negativo y que tiene una cota superior.

No negatividad de las concentraciones de biomasa y sustrato

Considérese primero que en algún momento $X = 0$. Entonces, sustituyendo en la ecuación (2.1) se obtiene que $\dot{X} = 0$ para cualquier Q_{en} . Por lo tanto, $X(t) = 0$ a partir de entonces. Si el valor inicial $X(0) = X_0$ es positivo, $X(t)$ nunca será negativo; es decir,

$$X(t) \geq 0 \quad \forall t \in [0, T_r], \quad (2.12)$$

donde T_r es el tiempo al final de la fase de reacción.

Esto mismo sucede si se considera $S = 0$. Sustituyendo en la ecuación (2.2) se tiene que $\dot{S} = S_{en} Q_{en} / V$. Como todos los términos del lado derecho son no negativos (recuérdese que $S_{en} > 0$), se ve que $\dot{S} \geq 0$. Nuevamente, si $S(0) = S_0 \geq 0$, entonces

$$S(t) \geq 0 \quad \forall t \in [0, T_r], \quad (2.13)$$

con T_r definido como antes.

Acotamiento superior de la concentración de sustrato

Dado que $\mu(S) \geq 0$, $Y > 0$ y, como ya se demostró, $X \geq 0$, se tiene que

$$\dot{S} = -\frac{1}{Y}\mu(S)X + (S_{\text{en}} - S)\frac{Q_{\text{en}}}{V} \leq (S_{\text{en}} - S)\frac{Q_{\text{en}}}{V}$$

Defínase la variable σ tal que $\sigma(0) = S(0) = S_0 \geq 0$ y

$$\dot{\sigma} = (S_{\text{en}} - \sigma)\frac{Q_{\text{en}}}{V}. \quad (2.14)$$

Nótese además que si $V(0) = V_0 > 0$, entonces

$$\int_0^t \frac{Q_{\text{en}}(\tau)}{V(\tau)} d\tau = \int_0^t \frac{dV(\tau)}{d\tau} \frac{d\tau}{V(\tau)} = \int_{V_0}^{V(t)} \frac{dV}{V} = \ln\left(\frac{V(t)}{V_0}\right). \quad (2.15)$$

Resolviendo la ecuación diferencial (2.14) se tiene que

$$\int_{\sigma(0)=S_0}^{\sigma(t)} \frac{d\sigma}{S_{\text{en}} - \sigma} = \int_0^t \frac{Q_{\text{en}}(\tau)}{V(\tau)} d\tau$$

$$\ln\left(\frac{S_{\text{en}} - S_0}{S_{\text{en}} - \sigma(t)}\right) = \ln\left(\frac{V(t)}{V_0}\right)$$

Por lo tanto

$$\sigma(t) = S_{\text{en}} - \frac{V_0}{V(t)} [S_{\text{en}} - S_0]. \quad (2.16)$$

Como $V(t) \geq V_0$, $\forall t \in [0, T_r]$, entonces $\frac{V_0}{V(t)} \leq 1$. La cota superior de σ depende de su valor inicial $\sigma(0) = S_0$:

1. Si $S_0 > S_{\text{en}}$ entonces

$$\sigma(t) = S_{\text{en}} + \frac{V_0}{V(t)} [S_0 - S_{\text{en}}] \leq S_{\text{en}} + [S_0 - S_{\text{en}}] = S_0;$$

2. Si $S_0 = S_{\text{en}}$ entonces $\sigma(t) = S_{\text{en}}$;

3. Si $S_0 < S_{\text{en}}$ (lo común), entonces el menor valor de $\frac{V_0}{V(t)}$ se da cuando $V(t) = V_f$ y por lo tanto

$$\sigma(t) \leq S_{\text{en}} - \frac{V_0}{V_f} [S_{\text{en}} - S_0].$$

Finalmente, como $\dot{S} \leq \dot{\sigma}$ y $S(0) = \sigma(0) = S_0$, entonces $S(t) \leq \sigma(t)$ y las cotas anteriores se aplican también a $S(t)$. Esto implica que el sustrato está acotado por:

$$0 \leq S(t) \leq \max \left(S_0, S_{\text{en}} - \frac{V_0}{V_f} [S_{\text{en}} - S_0] \right), \quad \forall t \in [0, T_r]. \quad (2.17)$$

Acotamiento superior de la concentración de biomasa

Considérese que $K_d = 0$. Esta suposición no afecta el acotamiento superior de X , ya que como $K_d \geq 0$ y $X(t) \geq 0$, el término $-K_d X$ en (2.1) siempre contribuye a no aumentar el valor de X . La ecuación (2.1) queda

$$\dot{X} = \mu(S)X - X \frac{Q_{\text{en}}}{V}.$$

La cota superior de X en este caso se encuentra mediante una variable auxiliar. Sea $z(t) \doteq Y S(t) + X(t)$. Entonces

$$\dot{z} = Y \dot{S} + \dot{X} = (Y S_{\text{en}} - z) \frac{Q_{\text{en}}}{V}.$$

Resolviendo la ecuación diferencial usando (2.15), se tiene que

$$\begin{aligned} \int_{z(0)}^{z(t)} \frac{dz}{Y S_{\text{en}} - z} &= \int_0^t \frac{Q_{\text{en}}(\tau)}{V(\tau)} d\tau \\ \ln \left(\frac{Y S_{\text{en}} - z(0)}{Y S_{\text{en}} - z(t)} \right) &= \ln \left(\frac{V(t)}{V_0} \right) \\ V_0 [Y S_{\text{en}} - z(0)] &= V(t) [Y S_{\text{en}} - z(t)]. \end{aligned}$$

Sustituyendo $z(t) = Y S(t) + X(t)$ y $z(0) = Y S_0 + X_0$ se llega a la siguiente expresión:

$$V(t) [X(t) - Y(S_{\text{en}} - S(t))] = V_0 [X_0 - Y(S_{\text{en}} - S_0)] =: \rho_0, \quad (2.18)$$

que define una superficie donde se mueven los estados del sistema y que depende de la condición inicial. Esto es consecuencia del hecho de que cuando no hay mortalidad de microorganismos, existe conservación de la masa y todo el sustrato consumido por la biomasa es transformado en materia celular. También implica que, dado que S y V son no negativos y acotados

superiormente y además el término de la derecha es una constante positiva, necesariamente X también debe ser acotado superiormente por un valor no negativo. De la ecuación (2.18),

$$X(t) = \frac{\rho_0}{V(t)} + Y(S_{\text{en}} - S(t)) \quad (2.19)$$

y se observa que la cota superior de $X(t)$ depende del signo de ρ_0 :

1. Si $\rho_0 > 0$, lo cual sucede si $X_0 > Y(S_{\text{en}} - S_0)$, entonces $X(t)$ alcanza su valor máximo cuando $V = V_0$ y $S = 0$:

$$X(t) < X_0 + Y S_0; \quad (2.20)$$

2. Si $\rho_0 \leq 0$, entonces, como $V(t) > 0$, de la ecuación (2.18) se ve que $X(t) - Y(S_{\text{en}} - S(t)) \leq 0$ y dado que $S(t) \geq 0$:

$$X(t) \leq Y S_{\text{en}}; \quad (2.21)$$

o bien, si se busca una cota menos conservadora, de la ecuación (2.19), $X(t)$ alcanza su valor máximo cuando $V = V_{\text{max}} \geq V_0$ y $S = 0$; esto es:

$$X(t) \leq \frac{V_0}{V_{\text{max}}}(X_0 + Y S_0) + \left(1 - \frac{V_0}{V_{\text{max}}}\right) Y S_{\text{en}}.$$

Las cotas para la biomasa se resumen entonces en las siguientes desigualdades:

$$0 \leq X(t) \leq \begin{cases} Y S_{\text{en}} & \text{si } X_0 \leq Y(S_{\text{en}} - S_0) \\ X_0 + Y S_0 & \text{si } X_0 > Y(S_{\text{en}} - S_0) \end{cases} \quad (2.22)$$

Obsérvese que generalmente en $t = 0$, al inicio de la fase de llenado, el volumen es pequeño y la concentración de sustrato es cercana a cero: $S_0 \approx 0$. Dado que durante la fase de vaciado del ciclo anterior no se retiró biomasa, la concentración X_0 es grande y por lo general mayor que $Y S_{\text{en}}$. Por lo tanto la cota superior es prácticamente X_0 misma.

Se observa también que la ecuación (2.19) implica que el incremento máximo de biomasa en cada ciclo no depende de la función de entrada $\mathcal{O}_{\text{en}}(t)$, sino sólo de la relación

$$V_f X_f - V_0 X_0 = Y(V_f - V_0) S_{\text{en}}, \quad (2.23)$$

donde se ha considerado que $S_0 = S_f = 0$ (estas son condiciones normales de operación de un biorreactor empleado como SBR), $V_f X_f - V_0 X_0$ es el incremento de biomasa al final de la etapa de reacción y V_f es el volumen en ese momento. Evidentemente este incremento es menor si se considera $K_d > 0$.

Acotamiento superior de la concentración de oxígeno disuelto

Supóngase que para $O(0) = O_0$ se tiene que $0 \leq O_0 \leq O_s$ y además $0 \leq O_{en} \leq O_s$. Esta suposición es razonable, ya que físicamente es imposible lograr concentraciones de oxígeno disuelto mayores que la de saturación.

Considerando el cambio de variable $C \doteq O - O_s$, $C_{en} \doteq O_{en} - O_s$, la dinámica de C queda descrita por:

$$\dot{C} = - \left(\frac{1}{Y_{XO}} \mu(S) + b \right) X + (C_{en} - C) \frac{Q_{en}}{V} - K_{la} C$$

Cuando $C = 0$, lo cual implica que $O = O_s$, esta ecuación queda

$$\dot{C} = - \left(\frac{1}{Y_{XO}} \mu(S) + b \right) X + C_{en} \frac{Q_{en}}{V}.$$

Como el término $\frac{1}{Y_{XO}} \mu(S) + b$ siempre es no negativo y $C_{en} \leq 0$, entonces $\dot{C} \leq 0$, $\forall t \in [0, T_r]$. Por lo tanto, si $C(0) = O_0 - O_s \leq 0$, entonces $C(t) \leq 0$ durante las fases de llenado y reacción, lo cual implica que

$$O(t) \leq O_s \quad \forall t \in [0, T_r]. \quad (2.24)$$

Este resultado es coherente con la situación física real, tal como se esperaba.

No negatividad de la concentración de oxígeno disuelto

Considérese la ecuación (2.3) y el caso de que $O = 0$:

$$\dot{O} = - \left(\frac{1}{Y_{XO}} \mu(S) + b \right) X + O_{en} \frac{Q_{en}}{V} + K_{la} O_s. \quad (2.25)$$

Evidentemente en este caso no puede asegurarse que $\dot{O} \geq 0$ y que por lo tanto $O(t)$ sea no negativa. Esto muestra que para bajas concentraciones de oxígeno el modelo no refleja la realidad física, lo cual proviene del hecho de

que el modelo de las ecuaciones (2.1) a (2.4) fue obtenido bajo la suposición de que el oxígeno disuelto no es un elemento limitante de la reacción y siempre se encuentra en concentración suficiente (véase la suposición iv de la sección 2.2.1). Esto se logra haciendo $K_1 a$ suficientemente grande, que equivale a proporcionar suficiente oxígeno por medio de los aireadores. El valor mínimo de $K_1 a$ se obtiene de la ecuación (2.25), procurando que $\dot{O} \geq 0$ para cualquier valor de X y S :

$$K_1 a \geq \frac{[bY_{XO} + \mu(S^*)]X_{\max}}{Y_{XO}O_s}, \quad (2.26)$$

lo cual se obtuvo considerando que μ es máximo en $S = S^*$, que el valor mínimo de $Q_{\text{en}}(t)$ es cero y que X_{\max} está dado por cualquiera de las cotas superiores de X encontradas anteriormente.

La concentración de oxígeno disuelto queda entonces acotada por:

$$0 \leq O(t) \leq O_s \quad \forall t \in [0, T_r]. \quad (2.27)$$

2.3.2 Puntos de equilibrio

Los puntos de equilibrio para un sistema dinámico se definen como aquéllos donde los estados del sistema no cambian.

Definición 1 Sea el sistema autónomo

$$\dot{x} = f(x) \quad (2.28)$$

donde $f : D \mapsto \mathbb{R}^n$ es un mapa Lipschitz de un dominio $D \subset \mathbb{R}^n$ al espacio \mathbb{R}^n . Un punto $\bar{x} \in D$ se dice de equilibrio si:

$$f(\bar{x}) = 0 \quad (2.29)$$

En el biorreactor estudiado, interesan los puntos de equilibrio durante la etapa de reacción cuando la entrada es cero: $Q_{\text{en}} = 0$. Se considerará además que $K_d = 0$ y $b = 0$, lo cual es coherente con la realidad física, puesto que ambos valores son relativamente cercanos a cero. Las ecuaciones resultantes son:

$$\dot{X} = 0 = \mu(\bar{S})\bar{X} \quad (2.30)$$

$$\dot{S} = 0 = -\frac{1}{Y}\mu(\bar{S})\bar{X} \quad (2.31)$$

$$\dot{O} = 0 = -\frac{1}{Y_{XO}}\mu(\bar{S})\bar{X} + K_1 a(O_s - \bar{O}) \quad (2.32)$$

$$\dot{V} = 0 = 0 \quad (2.33)$$

La ecuación (2.33) es evidente ya que el volumen es el resultado de integrar la entrada. Existen, por lo tanto una infinidad de puntos de equilibrio con $V = \bar{V}$, donde \bar{V} es una constante tal que $V_{\min} \leq \bar{V} \leq V_{\max}$. Considérese además el dominio de definición dado por las cotas encontradas anteriormente:

$$D = \{[X, S, O, V]^T \mid 0 \leq X \leq X_{\max}, 0 \leq S \leq S_{\max}, \\ 0 \leq O \leq O_s, V_{\min} \leq V \leq V_{\max}\}, \quad (2.34)$$

donde X_{\max} y S_{\max} están dadas por las cotas superiores respectivas.

De las ecuaciones (2.30) y (2.31), la definición de D y el hecho de que $\mu(S) \geq 0$, se obtienen dos puntos de equilibrio para cada \bar{V} :

1. Cuando $\mu(\bar{S}) = 0$, en el dominio D esto corresponde a $\bar{S} = 0$. En este caso \bar{X} es una constante comprendida entre los valores dados por las desigualdades (2.22) y $\bar{O} = O_s$. Este punto de equilibrio es precisamente el que se busca alcanzar durante la reacción, ya que corresponde a la total degradación del sustrato.
2. Cuando $\bar{X} = 0$, entonces \bar{S} es una constante comprendida entre las cotas dadas por (2.17) y $\bar{O} = O_s$. Este punto de equilibrio corresponde a la condición de que no haya lodos en el reactor, la cual es una situación que se desea evitar a toda costa.

2.3.3 Estabilidad de los puntos de equilibrio

Para hacer el análisis de estabilidad de los puntos de equilibrio primero hay que definir qué se entiende por *estabilidad*. A continuación se define la *estabilidad en el sentido de Lyapunov*.

Definición 2 Sea $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{0}$ un punto de equilibrio para (2.28).

- $\bar{\mathbf{x}}$ es estable si, para cada $\epsilon > 0$, existe un $\delta = \delta(\epsilon)$ tal que

$$\|\mathbf{x}(0)\| < \delta \Rightarrow \|\mathbf{x}(t)\| < \epsilon, \quad \forall t \geq 0.$$

- $\bar{\mathbf{x}}$ es asintóticamente estable si además δ se puede escoger tal que

$$\|\mathbf{x}(0)\| < \delta \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{x}(t) = \mathbf{0}.$$

- $\bar{\mathbf{x}}$ es inestable si no es estable.

La definición anterior se aplica al punto de equilibrio $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{0}$. Para incluir otros puntos de equilibrio $\bar{\mathbf{x}} \neq \mathbf{0}$, basta con hacer un cambio de variable $\mathbf{z} \doteq \mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}$. Entonces $\dot{\mathbf{z}} = \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{z} + \bar{\mathbf{x}}) \doteq \mathbf{g}(\mathbf{z})$. La nueva variable tiene un punto de equilibrio en el origen, ya que $\mathbf{g}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$.

Para determinar si los puntos de equilibrio son o no estables, se puede recurrir al teorema de Lyapunov, el cual se enuncia a continuación:

Teorema 1 Sea $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{0}$ un punto de equilibrio para (2.28) y $D \subset \mathbb{R}^n$ un dominio que contenga a $\bar{\mathbf{x}}$. Sea $\mathcal{V} : D \mapsto \mathbb{R}^n$ una función continuamente diferenciable, tal que

$$\mathcal{V}(\mathbf{0}) = 0 \quad \text{y} \quad \mathcal{V}(\mathbf{x}) > 0, \quad \forall \mathbf{x} \in D - \{\mathbf{0}\}, \quad (2.35)$$

$$\dot{\mathcal{V}}(\mathbf{x}) \leq 0, \quad \forall \mathbf{x} \in D. \quad (2.36)$$

Entonces, $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{0}$ es estable. Además, si

$$\dot{\mathcal{V}}(\mathbf{x}) < 0, \quad \forall \mathbf{x} \in D - \{\mathbf{0}\}, \quad (2.37)$$

entonces $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{0}$ es asintóticamente estable. A la función $\mathcal{V} : D \mapsto \mathbb{R}^n$ se le conoce como función de Lyapunov.

Para aplicar este teorema al primer conjunto de puntos de equilibrio dado por $\bar{\mathbf{x}} = [\bar{X}, 0, O_s, \bar{V}]^T$ se debe hacer un cambio de variable.

Sea $\mathbf{z} = [X - \bar{X}, S, O - O_s, V - \bar{V}]^T$. Entonces $\bar{\mathbf{z}} = \mathbf{0}$ es un punto de equilibrio para el sistema $\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{g}(\mathbf{z})$, el cual queda descrito por:

$$\dot{z}_1 = \mu(z_2)(z_1 + \bar{X}) \quad (2.38)$$

$$\dot{z}_2 = -\frac{1}{Y} \mu(z_2)(z_1 + \bar{X}) \quad (2.39)$$

$$\dot{z}_3 = -\frac{1}{Y_{XO}} \mu(z_2)(z_1 + \bar{X}) - K_1 a z_3 \quad (2.40)$$

$$\dot{z}_4 = 0 \quad (2.41)$$

Una función de Lyapunov para el sistema es:

$$\mathcal{V}(\mathbf{z}) = (z_1 + \bar{X}) + 3Y z_2 - Y_{XO} z_3 + z_4^2 \quad (2.42)$$

Nótese que cumple con la condición (2.35), ya que el dominio D donde se mueven las trayectorias del sistema está definido por (de las cotas encontradas para los estados):

$$D = \{[z_1, z_2, z_3, z_4]^T \mid -\bar{X} \leq z_1 \leq X_{\max} - \bar{X}, \\ 0 \leq z_2 \leq S_{\max}, -O_s \leq z_3 \leq 0, V_{\max} - \bar{V} \leq z_4 \leq V_{\min} - \bar{V}\}.$$

La derivada temporal de esta función de Lyapunov es:

$$\dot{V}(\mathbf{z}) = \dot{z}_1 + 3Y\dot{z}_2 - Y_{XO}\dot{z}_3 + 2z_4\dot{z}_4 \quad (2.43)$$

$$= -\mu(z_2)(z_1 + \bar{X}) + Y_{XO}K_I a z_3 \quad (2.44)$$

Dado que $z_1 + \bar{X} \geq 0$, $\mu(z_2) \geq 0$ y $z_3 \leq 0$ en el dominio de definición, se cumple efectivamente la condición (2.36): $\dot{V}(\mathbf{z}) \leq 0$. Por lo tanto este punto de equilibrio es estable.

Es fácil ver que no es asintóticamente estable, puesto que para cualquier $\delta S > 0$ se tiene que $\mu(\delta S) > 0$. Por lo tanto, de la ecuación (2.1) se observa que dado que $\dot{X} > 0$, entonces aún cuando S vuelva a ser cero, la concentración de biomasa ya habrá aumentado. Es decir, no se regresa al mismo punto de equilibrio, sino a $[\bar{X}', 0, O_s, \bar{V}]$, con $\bar{X}' \neq \bar{X}$. Lo que es asintóticamente estable es la superficie definida por $S = 0$, $O = O_s$.

El segundo conjunto de puntos de equilibrio (aquellos donde $\bar{X} = 0$ y $\bar{S} \neq 0$) es inestable en el sentido de Lyapunov. Considérese un punto tan cercano al de equilibrio como se desee: $[\delta X, \bar{S}, O_s, \bar{V}]^T \in D$. Entonces $\dot{X} > 0$ y $\dot{S} < 0$; es fácil ver que la trayectoria correspondiente a esta condición inicial tiende a un punto del otro conjunto de puntos de equilibrio, ya que X tiende a aumentar y S tiende a cero. Esto sucede para cualquier $\delta X > 0$.

Capítulo 3

Controlador de tiempo óptimo

Este capítulo describe el controlador de tiempo óptimo propuesto por Moreno y Buitrón [20, 19], pero sin ahondar en el desarrollo del mismo. Únicamente se presenta el resultado final y su interpretación. Primero se plantea el problema de hallar una ley control de tiempo óptimo para el sistema. Posteriormente se hace un análisis de controlabilidad bajo estas suposiciones, para después presentar el controlador y su interpretación física. Finalmente se hace un análisis de las propiedades del sistema en lazo cerrado con esta ley de control

3.1 Problema de control de tiempo óptimo

Para el sistema descrito por las ecuaciones (2.1) a (2.4) se busca obtener una *ley de control retroalimentado*, usando Q_{en} como entrada, que lo lleve de un estado inicial a un estado final que pertenezca a un conjunto de estados finales deseados, siguiendo una trayectoria admisible y usando una función de entrada admisible. Por otro lado, se busca que esta ley de control retroalimentado también minimice el tiempo que tarda en lograrlo.

Para hallar la ley de control primero se deben hacer algunas consideraciones, algunas de las cuales ya han sido tomadas en cuenta:

- i. No se considera la mortalidad de microorganismos ($K_d = 0$) y por lo tanto existe conservación de la masa entre el sustrato y la biomasa; todo el sustrato degradado por los microorganismos es transformado en masa celular.

- ii. El oxígeno se considera únicamente como un medio para que los lodos sobrevivan y su consumo no influye en el crecimiento de biomasa.
- iii. La concentración de sustrato en el influente es constante para todo $t \geq 0$ ($S_{en}(t) = S_{en}$). Aunque es una suposición fuerte para una planta de tratamiento a nivel industrial o municipal, es fácilmente reproducible en laboratorio usando aguas sintéticas. La suposición podría también ser eliminada, pero el análisis se hace más complicado [18].
- iv. Los parámetros de la planta son constantes y conocidos.
- v. Se tiene acceso al vector de estados completo.

El problema de control de tiempo óptimo también puede plantearse como buscar la función de entrada admisible que genere una trayectoria admisible y minimice la funcional de costo

$$J[Q_{en}] = \int_0^{T_r} d\tau, \quad (3.1)$$

donde T_r es el tiempo de reacción.

La función de entrada $Q_{en}(t)$ se considera admisible si está acotada por

$$0 \leq Q_{en}(t) \leq Q_{max} \quad (3.2)$$

y además

$$\int_0^{T_r} Q_{en}(\tau) d\tau = V_f - V_0 > 0, \quad (3.3)$$

donde V_f es el volumen final y V_0 es el volumen inicial, con $0 < V_f \leq V_{max}$.

Por otro lado, una trayectoria se considera admisible para todo $t \geq 0$ si se encuentra en la región

$$D_A = \{[X, S, O, V]^T \mid X \geq 0, S \geq 0, O \geq 0, V_{min} \leq V \leq V_{max}\}. \quad (3.4)$$

La región donde se desea que se encuentre el estado final debe ser un subconjunto de D_A y es:

$$\Xi_f = \{[X, S, O, V]^T \mid X \geq 0, 0 \leq S \leq S_{min}, O \geq 0, V = V_f\}. \quad (3.5)$$

Nótese que esta región no tiene restricciones en cuanto a los valores finales de X y O , excepto el hecho de que sean no negativos.

Se observa también que en el sistema estudiado, el comportamiento de las concentraciones de sustrato y biomasa no depende de la concentración de oxígeno. Por lo tanto el sistema se puede desacoplar y hacer el análisis de controlabilidad y diseño de la ley de control para el subsistema dinámico formado por las ecuaciones (2.1), (2.2) y (2.4). Esta consideración no afecta la admisibilidad de las trayectorias ni la pertenencia del estado final al subconjunto Ξ_f , ya que se ha garantizado que $O(t) \geq 0$ (véase la sección 2.3.1). El comportamiento del oxígeno disuelto estará entonces determinado por la solución de la ecuación diferencial (2.3) para O_0 y las trayectorias $X(t, Q_{en}, X_0)$, $S(t, Q_{en}, S_0)$ y $V(t, Q_{en}, V_0)$.

3.2 Análisis de controlabilidad

Para determinar si el subsistema estudiado es controlable primero hay que definir qué se entiende por la propiedad de controlabilidad. Considérese el sistema dinámico invariante en el tiempo afín en las entradas

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m \mathbf{g}_j(\mathbf{x})u_j \quad j = 1, 2, \dots, m, \quad (3.6)$$

donde $\mathbf{f} : D \mapsto \mathbb{R}^n$ y las $\mathbf{g}_j : D \mapsto \mathbb{R}^n$ son mapas de un dominio $D \subset \mathbb{R}^n$ donde se define el vector de estados $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ al espacio \mathbb{R}^n . El vector de entradas $\mathbf{u} = [u_1, u_2, \dots, u_m]^T$ se define en el dominio $U \subset \mathbb{R}^m$. La trayectoria del vector de estado \mathbf{x} para todo tiempo $t \in \mathbb{R}^+$ cuando se ha aplicado una función de entrada $\mathbf{u}_{[0,t]} : [0, t] \mapsto U$ con la condición inicial $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$ se denota por $\mathbf{x}(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0)$.

Definición 3 [21] *El sistema dinámico (3.6) se dice controlable si para cualesquiera dos estados $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in D$ existe un tiempo finito T y una función de entrada admisible $\mathbf{u}_{[0,T]}$ tal que $\mathbf{x}(T, \mathbf{u}, \mathbf{x}_1) = \mathbf{x}_2$. De otra manera el sistema dinámico es incontrolable.*

El subsistema estudiado bajo las suposiciones (i) a (iii) puede escribirse en forma compacta como:

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{f}(\mathbf{z}) + \mathbf{g}(\mathbf{z})Q_{en}, \quad (3.7)$$

donde $\mathbf{z} = [X, S, V]^T$ y $\mathbf{f}(\mathbf{z})$ y $\mathbf{g}(\mathbf{z})$ están definidas por las ecuaciones (2.1), (2.2) y (2.4). La región donde las trayectorias se consideran admisibles está

dada por

$$\Omega_A = \{[X, S, V]^T \mid X \geq 0, S \geq 0, V_{\min} \leq V \leq V_{\max}\}. \quad (3.8)$$

La región que define al estado final es un subconjunto de Ω_A :

$$\mathbf{Z}_f = \{[X, S, V]^T \mid X \geq 0, 0 \leq S \leq S_{\min}, V = V_f\}. \quad (3.9)$$

La solución de (3.7) para una condición inicial $\mathbf{z}_0 \in \Omega_A$ es única y se denota por $\mathbf{z}(t, Q_{\text{en}}, \mathbf{z}_0)$ para una función Q_{en} admisible y un estado inicial \mathbf{z}_0 cuando $t = 0$. Esta solución describe la trayectoria del estado para una condición inicial y una función de entrada dadas.

Como ya se demostró (ver la ecuación (2.18) de la sección 2.3.1), cuando $K_d = 0$, la superficie

$$\sigma(\mathbf{z}_0) : V[X - Y(S_{\text{en}} - S)] = \rho_0, \quad (3.10)$$

con $\rho_0 = V_0[X_0 - Y(S_{\text{en}} - S_0)]$ es invariante para toda función de entrada Q_{en} admisible; esto es, todas las trayectorias $\mathbf{z}(t, Q_{\text{en}}, \mathbf{z}_0)$ se mueven en esta superficie bidimensional del conjunto tridimensional Ω_A .

Una consecuencia directa de este resultado es que el sistema estrictamente *no es controlable*, ya que no cualquier par de puntos $\mathbf{z}_0, \mathbf{z}_1 \in \Omega_A$ puede ser conectado por una trayectoria $\mathbf{z}(t, Q_{\text{en}}, \mathbf{z}_0)$. Todos los puntos alcanzables desde \mathbf{z}_0 se sitúan en la superficie $\sigma(\mathbf{z}_0)$. Por lo tanto, el problema de control de tiempo óptimo no está bien planteado por la falta de controlabilidad. Sin embargo, pueden replantearse las ecuaciones del sistema para que lo esté.

La representación del sistema (3.7) cuando $K_d = 0$ no es mínima, ya que puede ser descrita únicamente por dos ecuaciones diferenciales ordinarias y una ecuación algebraica:

$$X = \frac{\rho_0}{V} + Y(S_{\text{en}} - S) \quad (3.11)$$

$$\dot{S} = -\left(\frac{\rho_0}{YV} + S_{\text{en}} - S\right)\mu(S) + (S_{\text{en}} - S)\frac{Q_{\text{en}}}{V} \quad (3.12)$$

$$\dot{V} = Q_{\text{en}}. \quad (3.13)$$

Este sistema no es controlable según la definición 3 ya que si $V_f < V_0$, no existe ninguna función de entrada admisible (i.e. no negativa) que conecte los estados inicial y final. Sin embargo, para los propósitos perseguidos en este trabajo, esto tampoco es necesario, ya que en realidad no interesa alcanzar cualquier estado, ni siquiera del sistema mínimo, sino sólo aquellos que se encuentran en la región \mathbf{Z}_f .

3.3 Ley de control

De la definición de la región Z_f se observa que no importa cómo sea el valor final de X ; sólo se requiere que sea no negativo. Por propiedades de invarianza de la región $\{[X, S, V]^T \mid X \geq 0, S \geq 0, V \geq 0\}$ con la entrada Q_{en} admisible, esto siempre se satisface, lo cual resulta útil en la búsqueda de la ley de control de tiempo óptimo, ya que entonces la trayectoria óptima se puede buscar tal que su proyección sobre el plano (S, V) sea óptima para las restricciones y condiciones impuestas.

Para hallar la ley de control óptimo se recurre a un método de solución basado en el teorema de Green (para un análisis más detallado, véase [19, 18]). El método consiste en determinar la región del plano (S, V) donde se puede encontrar la trayectoria de una posible solución (conjunto alcanzable). Después, usando el teorema de Green se evalúa la optimalidad relativa de cualesquiera dos posibles soluciones sin necesidad de resolver las ecuaciones diferenciales que describen al sistema. Con esto se determina la trayectoria óptima. Finalmente se busca una función de entrada Q_{en} admisible con la cual se logre la trayectoria óptima encontrada.

Sean $\mathbf{x}_0 = [S, V]^T$ y $\mathbf{X}_f = \{[S_f, V_f]^T \mid 0 \leq S_f \leq S_{\text{min}}\}$ las proyecciones de \mathbf{z}_0 y \mathbf{Z}_f sobre el plano (S, V) y sea $\mathbf{x}_f = [0, V_f]^T \in \mathbf{X}_f$. Moreno [19] demuestra que el conjunto donde se encuentra toda trayectoria posible es la región acotada por el segmento $\lambda = \{(S, V) \mid S = 0, 0 \leq V \leq V_f\}$ sin incluirlo y las trayectorias $\mathbf{x}(t, 0, \mathbf{x}_0)$, $\mathbf{x}(t, Q_{\text{max}}, \mathbf{x}_0)$ y $\mathbf{x}(-t, 0, \mathbf{x}_f)$ (véase la figura 3.1). Este conjunto es no vacío y por lo tanto se garantiza la existencia de una solución al problema de control de tiempo óptimo.

Para $\mu(S)$ dada por la ley de Haldane o cualquier otra función monótonica, positiva, acotada superiormente y con un sólo máximo, al usar el teorema de Green se encuentra que cuando $S_0 \leq S_{\text{en}}$ y $0 \leq S^* \leq S_{\text{en}}$, la trayectoria óptima está dada por un máximo de tres arcos, dependiendo de la posición inicial de (S_0, V_0) :

1. Si $V_0 = V_f$ entonces hay que seguir la trayectoria $\mathbf{x}(-t, 0, \mathbf{X}_f)$ en sentido contrario (ver $\mathbf{x}_0^{(1)}$ en la figura 3.2).
2. Si $V_0 < V_f$ y $S_0 \geq S^*$, entonces la trayectoria óptima consiste de tres arcos (ver $\mathbf{x}_0^{(2)}$ en la figura 3.2):
 - (a) Seguir la trayectoria $\mathbf{x}(t, 0, \mathbf{x}_0)$ hasta que $S = S^*$;

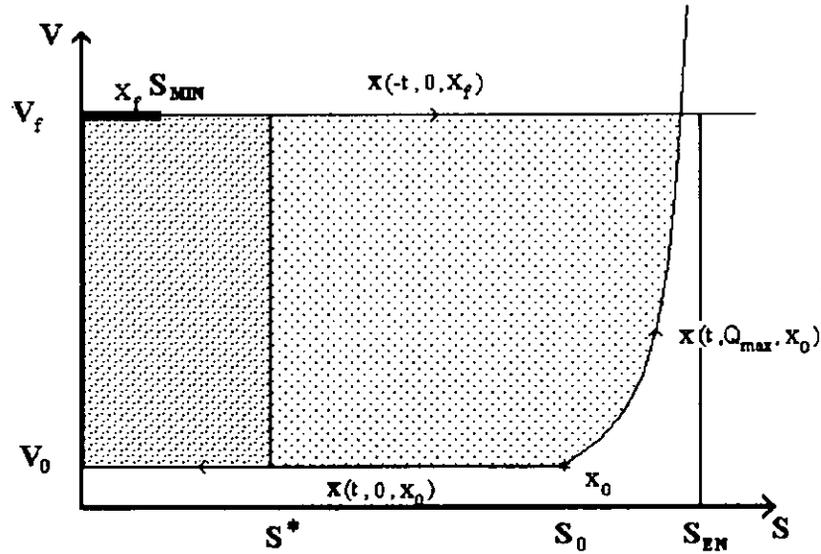


Figura 3.1: Conjunto alcanzable para el problema de control óptimo

- (b) Seguir la trayectoria $\mathbf{x}(t, Q_{\text{sing}}, [S^*, V_0]^T)$ hasta que $V = V_f$;
- (c) Si aún $S > S_{\text{min}}$, entonces seguir la trayectoria $\mathbf{x}(-t, 0, [S^*, V_f]^T)$ hasta que $S \leq S_{\text{min}}$.
3. Si $V_0 < V_f$ y $S_0 < S^*$ entonces seguir la trayectoria $\mathbf{x}(t, Q_{\text{max}}, \mathbf{x}_0)$ hasta que $S = S^*$ para luego continuar con el paso 2b o 2c según sea el caso (ver $\mathbf{x}_0^{(3)}$ en la figura 3.2).

La ley de control retroalimentado que produce la trayectoria óptima para cualquier \mathbf{z}_0 es la siguiente:

$$Q_{\text{en}} = \begin{cases} 0, & \text{si } (V \geq V_f) \text{ ó } (S > S^*) \\ Q_{\text{sing}}, & \text{si } (V < V_f) \text{ y } (S = S^*) \\ Q_{\text{max}}, & \text{si } (V < V_f) \text{ y } (S < S^*) \end{cases}, \quad (3.14)$$

donde Q_{sing} es el flujo de entrada tal que $S = S^*$ y está dado por:

$$Q_{\text{sing}} = \frac{\mu^* V X}{Y(S_{\text{en}} - S)}. \quad (3.15)$$

La reacción termina cuando se llega a \mathbf{Z}_f ; esto es, cuando $(V = V_f)$ y $(S \leq S_{\text{min}})$. Cabe aclarar que por lo pronto se requiere que $Q_{\text{sing}} \leq Q_{\text{max}}$ para garantizar la optimalidad del control.

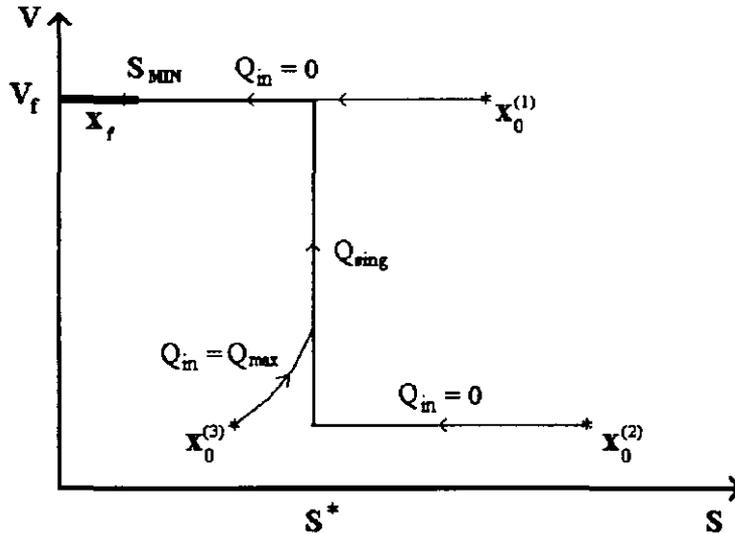


Figura 3.2: Trayectoria óptima para tres condiciones iniciales.

Para hallar la expresión de la ecuación (3.15) basta con hacer $\dot{S} = 0$ estando en $S = S^*$, y despejar Q_{en} de la ecuación (3.12).

Físicamente lo que busca la ley de control es mantener, mientras sea posible, la concentración de sustrato en un valor con el cual la tasa de crecimiento de microorganismos sea máxima, incrementando así la eficiencia de degradación; este valor es precisamente S^* (ver figura 2.2). Si $S > S^*$, no debe entrar más sustrato al biorreactor para esperar que éste sea degradado hasta llegar a esa concentración crítica. Si $S < S^*$ entonces hay que proporcionar sustrato tan rápido como sea posible para que la concentración se incremente hasta ese valor. Si el biorreactor ya ha llegado a su volumen final, no se debe llenar más y sólo hay que esperar que degrade el sustrato hasta que $S \leq S_{min}$.

Cabe recalcar que la ley de control encontrada es tal que no importa cuáles sean los valores finales de X y O . En el primer caso, X_f está determinado por la ecuación (3.11) y es independiente de cuál haya sido la función de entrada $Q_{en}(t)$. En el segundo caso, O_f y la trayectoria que sigue $O(t)$ se determinan por la ecuación diferencial que la describe.

La estabilidad entrada-estados de la planta en lazo cerrado está garantizada, ya que la ley de control es tal que $\int_0^{T_r} Q_{en}(\tau) d\tau = V_f - V_0$ es finito y $Q_{en}(t)$ está acotada (véase la sección 2.3.1).

Esta ley de control requiere la medición de X , S y V para poder ser

implantada; no requiere la medición de O , ya que este estado se encuentra desacoplado del subsistema estudiado. Como se verá más adelante, se incluye en el modelo únicamente para poder diseñar el observador.

Capítulo 4

Observadores de estados

En este capítulo se describe el uso de observadores para estimar los estados no medibles del sistema. Inicialmente se presentan algunas definiciones útiles para después hacer un análisis de observabilidad. Posteriormente se presentan diferentes estrategias de diseño de observadores y se analiza su aplicabilidad al sistema.

4.1 Justificación

Para poder implantar la ley de control óptimo expuesta en el capítulo anterior se requieren medir en línea el volumen y las concentraciones de sustrato y biomasa presentes en el biorreactor. Sin embargo esto es impracticable, ya que los sensores son excesivamente costosos o las técnicas de medición son demasiado tardadas.

Una manera de resolver este problema consiste en estimar, a partir de las entradas y salidas de la planta, los estados que no se pueden medir, para después usarlos en el controlador óptimo como si fueran los reales. Específicamente en este caso, se busca diseñar un *observador* suficientemente rápido que estime los estados del biorreactor sólo durante las fases de llenado y reacción, ya que durante las otras etapas no se emplea el controlador de tiempo óptimo que requiere el conocimiento del vector de estados completo.

En este trabajo se considera que los únicos estados medibles en línea son el volumen y la concentración de oxígeno disuelto. La medición de este último no se requiere para implantar la ley de control óptimo. Además, la dinámica de la degradación de sustrato y del crecimiento de biomasa no

depende de ella (siempre y cuando exista suficiente oxígeno en el medio). ¿Entonces por qué se incluye en el modelo? En primer lugar, la sola medición del volumen no aporta ninguna información referente a la dinámica de las otras dos concentraciones no medibles (biomasa y sustrato). En segundo lugar, la concentración de oxígeno disuelto guarda una relación estrecha con la tasa de respiración de la biomasa. La medición e interpretación de ésta última ha sido utilizada con éxito para el control de bioprocesos aerobios en una técnica conocida como *respirometría* [24], la cual hasta ahora sólo ha sido utilizada para reactores en *batch*; es decir, bajo la suposición de que el volumen no cambia durante la reacción. Finalmente, la medición en línea de la concentración de oxígeno disuelto es relativamente económica, confiable y sencilla. La relación matemática entre esta variable y las demás queda descrita por la ecuación (2.3).

Como el volumen se considera medible, para las fases de llenado y reacción se puede definir una nueva variable de entrada que también es medible: la tasa de dilución de entrada $D_{en} \doteq Q_{en}/V$. El modelo con el cual se busca diseñar un observador de estados queda descrito por el sistema SISO:

$$\dot{X} = \mu(S)X - K_d X - X D_{en} \quad (4.1)$$

$$\dot{S} = -\frac{1}{Y} \mu(S)X + (S_{en} - S) D_{en} \quad (4.2)$$

$$\dot{O} = -\left(\frac{1}{Y_{XO}} \mu(S) + b\right) X + (O_{en} - O) D_{en} + K_{la}(O_s - O). \quad (4.3)$$

4.2 Análisis de observabilidad

Antes de intentar diseñar un observador de estados para un sistema no lineal se debe verificar si éste es observable. Sin embargo, a diferencia de los sistemas lineales, la observabilidad no siempre implica que se pueda construir un observador para el sistema. Existen también diferentes tipos de observabilidad. A continuación se presentan algunas definiciones y posteriormente se analiza el sistema de las ecuaciones (4.1) a (4.3) para ver cuáles satisface.

4.2.1 Definiciones

Considérese el sistema afín en las entradas descrito por la ecuación (3.6) con una única salida $y \in \mathfrak{R}$. Esto es:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m \mathbf{g}_j(\mathbf{x})u_j & j = 1, 2, \dots, m \\ y &= h(\mathbf{x})\end{aligned}\quad (4.4)$$

donde $\mathbf{f} : D \mapsto \mathfrak{R}^n$, $\mathbf{g}_j : D \mapsto \mathfrak{R}^n$ y $h : D \mapsto \mathfrak{R}$. Nuevamente el vector de estados \mathbf{x} para todo tiempo $t \in \mathfrak{R}^+$ cuando se ha aplicado una función de entrada $\mathbf{u}_{[0,t]} : [0,t] \mapsto U$ con la condición inicial $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$ se denota por $\mathbf{x}(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0)$. Adicionalmente, sea $y(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0) = h(\mathbf{x}(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0))$.

La noción de observabilidad parte de la noción de indistinguibilidad para dos estados.

Definición 4 [21] *Dos estados $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in D$ se dicen indistinguibles para el sistema (4.4) si para toda función de entrada $\mathbf{u}_{[0,t]}$ admisible, las funciones de salida $y(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}_1)$ e $y(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}_2)$ son idénticas para todo $t \in \mathfrak{R}^+$ en su dominio de definición. El sistema se dice observable si la indistinguibilidad de cualquier pareja $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in D$ implica que $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$.*

La definición anterior implica que un sistema es observable si existe al menos una función de entrada $\mathbf{u}_{[0,t]}$ para cada pareja de estados iniciales en el dominio D que permita distinguirlos mediante la observación de la salida correspondiente. La propiedad de observabilidad es genérica en el sentido de que casi todo sistema dinámico es observable [1].

Definición 5 [9] *El sistema (4.4) se dice completamente observable si cualquier función de entrada $\mathbf{u}_{[0,t]} \in C^\infty$ admisible cumple con lo siguiente:*

$$\exists t \geq 0 \quad \text{tal que} \quad y(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}_1) \neq y(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}_2), \quad \forall \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in D, \mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}_2.$$

A las funciones de entrada que cumplen con esta condición se les llama entradas universales.

Las entradas universales permiten distinguir cualquier pareja de condiciones iniciales mediante sus salidas correspondientes. Cuando existe alguna función que no distinga dos estados iniciales diferentes, el sistema no es completamente observable. A este tipo de entradas se les conoce como *entradas malas*.

Para las siguientes definiciones considérese el sistema (4.4) sin entradas

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{f}(\mathbf{x}) \\ y &= h(\mathbf{x}).\end{aligned}\tag{4.5}$$

Si el sistema (4.5) es observable en el dominio D entonces esta condición es equivalente al requerimiento de que un conjunto de funciones, llamado el espacio de observación, $\mathcal{O} = \{h, L_f h, \dots, L_f^i h, \dots | i \geq 0\}$ separe todos los puntos en D ; es decir, que para toda pareja $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in D$ exista $i \geq 0$ tal que $L_f^i h(\mathbf{x}_1) \neq L_f^i h(\mathbf{x}_2)$. El operador L denota la derivada de Lie, que se define para una función $h \in C^\infty : D \mapsto \mathfrak{R}$ como $L_f h = \nabla h^T \cdot \mathbf{f}$. La notación que se usa es tal que $L_f^0 h = h$, $L_f^1 h = L_f h$ y $L_f^k h = L_f(L_f^{k-1} h)$.

Cuando un sistema es observable el mapa $T: \mathfrak{R}^n \mapsto \mathfrak{R}^n$ definido por

$$\mathbf{z} = T(\mathbf{x}) = [h(\mathbf{x}), L_f h(\mathbf{x}), \dots, L_f^{n-1} h(\mathbf{x})]^T\tag{4.6}$$

es regular en casi todas partes [10]. Nótese que este mapa es equivalente a

$$\mathbf{z} = \begin{matrix} \text{\scriptsize }^{(n-1)} \\ \mathbf{y} \end{matrix} \doteq \left[y, \dot{y}, \ddot{y}, \dots, \begin{matrix} \text{\scriptsize }^{(n-1)} \\ y \end{matrix} \right]^T.\tag{4.7}$$

Si el mapa es un difeomorfismo, el sistema (4.5) en las coordenadas del codominio de la transformación queda descrito por:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{z}} &= \begin{bmatrix} \dot{z}_1 \\ \dot{z}_2 \\ \vdots \\ \dot{z}_{n-1} \\ \dot{z}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_n \\ \varphi(\mathbf{z}) \end{bmatrix} \\ y &= z_1,\end{aligned}\tag{4.8}$$

donde $\mathbf{z} = [z_1, z_2, \dots, z_n]^T$ y $\varphi: \mathfrak{R}^n \mapsto \mathfrak{R}$ es una función no lineal.

Con esta notación puede plantearse la siguiente definición:

Definición 6 [10] *El sistema sin entradas (4.5) es uniformemente observable si $T: D \mapsto T(D)$ es un difeomorfismo y la función φ puede extenderse de D a todo \mathfrak{R}^n mediante una función C^∞ globalmente Lipschitz en \mathfrak{R}^n .*

Nótese que la observabilidad uniforme implica que cualquier pareja de estados iniciales puede distinguirse en cualquier instante mediante la observación de la salida y $n - 1$ de sus derivadas temporales, ya que entonces el mapa dado por (4.7) es invertible.

Para sistemas con entradas se tiene la siguiente definición:

Definición 7 [10] *El sistema con entradas (4.4) es uniformemente observable para toda entrada si el sistema autónomo (4.5) es uniformemente observable y todas las funciones de entrada $\mathbf{u}_{[0,t]}$ admisibles son universales.*

Otra definición útil es la de observabilidad linealizada:

Definición 8 *El sistema con entradas (4.4) es linealizablemente observable alrededor de una trayectoria si su linealización alrededor de una trayectoria $\mathbf{x}(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0)$ (inclusive un punto de operación) es observable en t_0 .*

La linealización del sistema (4.4) alrededor de la trayectoria $\mathbf{x}(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0)$ está dada por

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{\mathbf{x}}} &= F(\mathbf{x}, t)\tilde{\mathbf{x}} + G(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}, & \tilde{\mathbf{x}}(0) &= \tilde{\mathbf{x}}_0 \\ \tilde{y} &= H(\mathbf{x}, t)\tilde{\mathbf{x}},\end{aligned}\tag{4.9}$$

donde $\tilde{\mathbf{x}} \doteq \mathbf{x} - \mathbf{x}(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0)$ y $\tilde{y} \doteq y - y(t, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0)$, con

$$\begin{aligned}F(\mathbf{x}, t) &= \left[\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \right] + \sum_{j=1}^m \left[\frac{\partial g_j}{\partial \mathbf{x}} \right] u_j; \\ G(\mathbf{x}, t) &= [g_1(\mathbf{x}), g_2(\mathbf{x}), \dots, g_m(\mathbf{x})]; \\ H(\mathbf{x}, t) &= \left[\frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}} \right].\end{aligned}\tag{4.10}$$

Nótese que aunque las matrices F , G y H aparecen dependientes de $\mathbf{x}(t)$, esto último se refiere a la trayectoria conocida *a priori* alrededor de la cual se linealiza, por lo que en realidad únicamente dependen del tiempo. El sistema es entonces lineal variante en el tiempo; su observabilidad se define para un tiempo t_0 y puede verificarse con ayuda del siguiente teorema:

Teorema 2 [6] *El sistema lineal variante en el tiempo*

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}} &= A(t)\mathbf{x}(t) + B(t)\mathbf{u}(t), & \mathbf{x}(0) &= \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{y} &= C(t)\mathbf{x}(t) + D(t)\mathbf{u}(t),\end{aligned}\tag{4.11}$$

donde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$ y $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$, es observable en t_0 si existe un $t_1 > t_0$ finito tal que $\rho[\mathcal{O}(t_1)] = n$, donde $\rho[\cdot]$ denota el rango de la matriz y

$$\mathcal{O}(t_1) \doteq \begin{bmatrix} N_0(t_1) \\ N_1(t_1) \\ \vdots \\ N_{n-1}(t_1) \end{bmatrix}, \quad \text{con} \quad \begin{aligned} N_0(t) &= C(t) \\ N_{k+1}(t) &= N_k(t)A(t) + \frac{d}{dt}N_k(t), \\ &k = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Una propiedad importante de sistemas lineales variantes en tiempo es la observabilidad completa y uniforme (UCO por sus siglas en inglés), la cual es usualmente empleada como condición para el diseño de observadores o de controladores adaptables:

Definición 9 [12] *El sistema lineal variante en el tiempo (4.11) se dice completa y uniformemente observable (UCO) si existen constantes $\beta_1, \beta_2, \nu > 0$, tales que para toda $t_0 \geq 0$:*

$$\beta_2 I \geq N(t_0, t_0 + \nu) \geq \beta_1 I, \quad (4.12)$$

donde

$$N(t_0, t_0 + \nu) = \int_{t_0}^{t_0 + \nu} \Phi^T(\tau, t_0) C^T(\tau) C(\tau) \Phi(\tau, t_0) d\tau$$

es el llamado *grammiano de observabilidad*, con $\Phi(t, t_0)$ la matriz de transición de estados asociada con $A(t)$.

Con base en esta definición puede plantearse la siguiente definición para sistemas no lineales:

Definición 10 *El sistema no lineal (4.4) se dice linealizablemente completa y uniformemente observable (LUCO) si su linealización alrededor de cualquier trayectoria es UCO.*

Cabe aclarar que puede ocurrir que un sistema no lineal sea linealizablemente observable para alguna trayectoria, pero no para otras. En cambio, si la linealización del sistema no lineal alrededor de alguna trayectoria no es UCO, entonces el sistema no es LUCO. El hecho de que un sistema no sea linealizablemente observable para toda trayectoria o que no sea LUCO no implica que no sea completamente observable.

4.2.2 Análisis de observabilidad del sistema

Observabilidad

El biorreactor aerobio estudiado, representado por las ecuaciones (4.1), (4.2) y (4.3), es afín en la entrada D_{en} .

Proposición 1 *El sistema de las ecuaciones (4.1), (4.2) y (4.3) es observable en el sentido de la definición 4.*

Demostración: Considérense dos estados iniciales diferentes

$$\mathbf{x}_1 = [X_1, S_1, O_1]^T \neq [X_2, S_2, O_2]^T = \mathbf{x}_2.$$

Si $O_1 \neq O_2$, entonces las trayectorias de salida son diferentes por definición y los estados iniciales son distinguibles para cualquier entrada.

Si $O_1 = O_2$ y $X_1(\mu(S_1)/Y_{XO} + b) \neq X_2(\mu(S_2)/Y_{XO} + b)$, la entrada cero $D_{\text{en}}(t) = 0$ provoca que $\dot{O}_1 \neq \dot{O}_2$ y que por lo tanto las trayectorias $O(t, 0, O_1)$ y $O(t, 0, O_2)$ sean diferentes, distinguiendo así los dos estados iniciales.

Si ahora $O_1 = O_2$ y $X_1(\mu(S_1)/Y_{XO} + b) = X_2(\mu(S_2)/Y_{XO} + b)$, entonces, aunque $\dot{O}_1 = \dot{O}_2$, siempre se puede escoger una función de entrada $D_{\text{en}}(t)$ tal que $\dot{X}_1 \neq \dot{X}_2$ ó $\dot{S}_1 \neq \dot{S}_2$ y con la cual, en el siguiente instante $\dot{O}(0^+, D_{\text{en}}, O_1) \neq \dot{O}(0^+, D_{\text{en}}, O_2)$, provocando así que las trayectorias iniciando en O_1 y O_2 sean diferentes.

Como existe al menos una entrada con la cual se pueden distinguir cualesquiera dos estados iniciales, el sistema es observable. $\diamond\diamond$

Observabilidad completa

Proposición 2 *El sistema (4.1-4.3) no es completamente observable. Es decir, existen entradas malas que no permiten distinguir dos estados iniciales particulares a partir de la medición de la salida.*

Demostración: Considérense dos estados iniciales \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_2 tales que $X_1 = X_2$, $O_1 = O_2$ y $S_1 \neq S_2$, pero $\mu(S_1) = \mu(S_2)$.

La siguiente función de entrada no permite distinguir estos dos estados iniciales:

$$D_{\text{en}}(t) = \frac{\mu(S)X(t)}{Y \left[S_{\text{en}} - 2 \left(\frac{S_1(t)S_2(t)}{S_1(t) + S_2(t)} \right) \right]}, \quad (4.13)$$

donde $S_1(t)$ y $S_2(t)$ representan las trayectorias $S(t, D_{\text{en}}, S_1)$ y $S(t, D_{\text{en}}, S_2)$ respectivamente y $\mu(S) = \mu(S_1(t)) = \mu(S_2(t))$. Esta función de entrada provoca que para las dos trayectorias iniciando en x_1 y x_2 se tenga que $\mu(S_1(t)) = \mu(S_2(t)) \forall t \geq 0$. La consecuencia de esto es que las trayectorias $O_1(t)$ y $O_2(t)$ sean idénticas para todo $t \geq 0$, aunque $S_1(t) \neq S_2(t)$. Cabe hacer notar que $S(t, D_{\text{en}}, S_i)$ tiende a S^* para $i = 1, 2$.

La expresión (4.13) se encuentra buscando la función de entrada que provoque que $\mu(S_1(t)) = \mu(S_2(t))$. Esto es, $d\mu(S_1) = d\mu(S_2)$ para una misma dt . Se sabe que

$$\frac{d\mu}{dt} = \frac{d\mu}{dS} \frac{dS}{dt} = \mu'(S)\dot{S},$$

donde $\mu'(S) = \frac{d\mu}{dS}$. Por lo tanto, haciendo $\frac{d\mu(S_1)}{dt} = \frac{d\mu(S_2)}{dt}$ se tiene que

$$\mu'(S_1) \left[-\mu(S_1) \frac{X}{Y} + (S_{\text{en}} - S_1) D_{\text{en}} \right] = \mu'(S_2) \left[-\mu(S_2) \frac{X}{Y} + (S_{\text{en}} - S_2) D_{\text{en}} \right],$$

de donde

$$D_{\text{en}} = \frac{\mu(S)X[\mu'(S_1) - \mu'(S_2)]}{Y[(S_{\text{en}} - S_1)\mu'(S_1) - (S_{\text{en}} - S_2)\mu'(S_2)]}.$$

Obsérvese que cuando $S_1 \neq S_2$ y $\mu(S_1) = \mu(S_2)$, entonces $\mu'(S_1)$ y $\mu'(S_2)$ son de signo contrario. Si además $S_i < S_{\text{en}}$, $i = 1, 2$ (una suposición razonable), entonces tanto el numerador como el denominador de la expresión anterior tienen el mismo signo, y por lo tanto D_{en} siempre es positiva.

Sustituyendo las expresiones para $\mu(S)$ y $\mu'(S)$ y notando que $S_1 S_2 = K_S K_I$ se llega a la expresión (4.13). $\diamond\diamond$

Observabilidad uniforme

Proposición 3 *El sistema estudiado sin entradas no es uniformemente observable, ya que existen parejas de estados que no se pueden distinguir a partir de la salida y $n - 1 = 2$ derivadas temporales.*

Demostración: Considérese que $D_{\text{en}}(t) = 0, \forall t \geq 0$, lo cual implica que $Q_{\text{en}} = 0$ y por lo tanto el volumen permanece constante en un valor positivo acotado por V_{min} y V_{max} . Por simplicidad, hágase la suposición de que $K_d = 0$. Todas las trayectorias se mueven en una superficie y la representación mínima

del sistema queda dada por dos ecuaciones diferenciales y una algebraica, que en este caso son (compárense las ecuaciones (3.11) a (3.13)):

$$X = Y(\zeta_0 - S) \quad (4.14)$$

$$\dot{S} = -(\zeta_0 - S)\mu(S) \quad (4.15)$$

$$\dot{O} = -Y \left(\frac{\mu(S)}{Y_{XO}} + b \right) (\zeta_0 - S) + K_I a (O_s - O) \quad (4.16)$$

donde $\zeta_0 \doteq X_0/Y + S_0$ es un parámetro que depende de la condición inicial¹.

Para demostrar que el conocimiento de la salida y su primera y segunda derivada no bastan para distinguir cualquier pareja de estados iniciales, se considerarán conjuntos cada vez más pequeños de parejas de estados iniciales diferentes que son indistinguibles hasta alguna derivada de la salida. Esto se hará hasta la segunda derivada y se verá que el conjunto no es vacío. Considérese primero el dominio de definición D y el conjunto de parejas de estados iniciales tales que $O_1 = O_2$; es decir:

$$P_0 \doteq \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) | O_1 = O_2; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in D\}.$$

Evidentemente este conjunto no es vacío, ya que cualquier pareja de puntos en una superficie definida por $O = O_0$, con O_0 una constante, pertenece al conjunto P_0 .

Ahora considérese el conjunto $P_1 \subset P_0$ de parejas de estados iniciales tales que $\dot{O}_1 = \dot{O}_2$:

$$P_1 \doteq \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) | \dot{O}_1 = \dot{O}_2; (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \in P_0\}.$$

En $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_i$, se tiene que $\zeta_0 - S_i = X_i/Y$, $i = 1, 2$. Por lo tanto, de (4.16),

$$\dot{O}_i = - \left(\frac{\mu(S_i)}{Y_{XO}} + b \right) X_i + K_I a (O_s - O_i), \quad i = 1, 2.$$

Haciendo $\dot{O}_1 = \dot{O}_2$ y considerando que $O_1 = O_2$, de la ecuación anterior se obtiene la condición que define a los elementos de P_1 :

$$(\mu(S_1) + bY_{XO})X_1 \stackrel{!}{=} (\mu(S_2) + bY_{XO})X_2. \quad (4.17)$$

Es claro que el conjunto P_1 no es vacío. Escójanse por ejemplo X_1 , S_1 y S_2 dentro del dominio de definición D ; entonces X_2 puede despejarse de la

¹ $\zeta_0 = \frac{p_0}{V} + S_{en}$ cuando $V = V_0$.

ecuación (4.17) y existirá al menos algún valor tal que $\mathbf{x}_2 \in D$ para algunos X_1 y $S_1 \neq S_2$.

Como P_1 no es vacío se necesita ver si $P_2 \subset P_1$ lo es:

$$P_2 = \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) | \ddot{O}_1 = \ddot{O}_2; (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \in P_1\}.$$

La segunda derivada de O evaluada en \mathbf{x}_i , $i = 1, 2$, está dada por

$$\ddot{O}_i = \left[\frac{\mu'(S_i)}{Y_{XO}} X_i - Y \left(\frac{\mu(S_i)}{Y_{XO}} + b \right) \right] \frac{\mu(S_i)}{Y} X_i - K_1 a \dot{O}_i, \quad i = 1, 2,$$

donde $\mu'(S_i) = \frac{d}{ds} \mu(S) \Big|_{S=S_i}$. Al igualar \ddot{O}_1 con \ddot{O}_2 y notar que $\dot{O}_1 = \dot{O}_2$ se llega a la siguiente relación que deben satisfacer las parejas de estados iniciales que pertenezcan a P_2 :

$$\begin{aligned} & [\mu'(S_1)X_1 - Y(\mu(S_1) + bY_{XO})] X_1 \mu(S_1) \stackrel{!}{=} \\ & [\mu'(S_2)X_2 - Y(\mu(S_2) + bY_{XO})] X_2 \mu(S_2). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Como los elementos de P_2 deben estar contenidos en P_1 la condición dada por la ecuación (4.17) también debe satisfacerse. Al sustituir la expresión resultante para X_2 en la ecuación (4.18) y reacomodar términos se obtiene un polinomio en X_1 igualado a cero, cuyas raíces son $X_1 = 0$ y

$$X_1 = \frac{Y[\mu(S_1) - \mu(S_2)](\mu(S_2) + bY_{XO})}{\mu'(S_1)\mu(S_2) - \left(\frac{\mu(S_2) + bY_{XO}}{\mu(S_1) + bY_{XO}} \right)^2 \mu'(S_2)\mu(S_1)}. \quad (4.19)$$

X_1 debe ser positivo y se puede ver que existen parejas (S_1, S_2) para las cuales esto se cumple. Supóngase por ejemplo que $S_1 < S^*$, $S_2 > S^*$ y que $\mu(S_1) > \mu(S_2)$; entonces tanto el numerador como el denominador de (4.19) son positivos, ya que $\mu(S) > 0$ para cualquier S en el dominio de definición y $\mu'(S_1) > 0$ y $\mu'(S_2) < 0$ (véase la curva de Haldane en la figura 2.2). Esto mismo se puede hacer para hallar un numerador y denominador negativos que resultan en X_1 positivo. Sustituyendo en la ecuación (4.17) se observa que X_2 también es positivo. Se concluye que P_2 no es vacío y por lo tanto el sistema sin entradas no es uniformemente observable. $\diamond\diamond$

Proposición 4 *El sistema estudiado no es uniformemente observable para toda entrada.*

Demostración: Como el sistema sin entradas no es uniformemente observable, tampoco lo es para toda entrada. $\diamond\diamond$

Observabilidad linealizada completa y uniforme

La linealización alrededor de una trayectoria está dada por la expresión (4.9) y las matrices F, G y H expuestas anteriormente. Para el sistema estudiado, $H = [0, 0, 1]$ y F está dada por (usando la notación anterior):

$$F = \begin{bmatrix} \mu(S) - D_{\text{en}} - K_d & X\mu'(S) & 0 \\ -\frac{1}{Y}\mu(S) & -\left(\frac{X}{Y}\mu'(S) + D_{\text{en}}\right) & 0 \\ -\left(\frac{1}{Y_{XO}}\mu(S) + b\right) & -\frac{X}{Y_{XO}}\mu'(S) & -(K_I a + D_{\text{en}}) \end{bmatrix}. \quad (4.20)$$

Proposición 5 *El sistema de las ecuaciones (4.1) a (4.3) no es linealizablemente completa y uniformemente observable (LUCO).*

Demostración: Considérense las trayectorias que inicien con $S_0 = S^*$ y que sigan el arco singular dado por el controlador óptimo. En este caso $S(t) = S^*$ y por lo tanto $\mu(S^*) = \mu^*$ permanece constante y $\mu'(S^*) = 0$. Entonces

$$F(t) = \begin{bmatrix} \mu^* - D_{\text{en}}(t) - K_d & 0 & 0 \\ -\frac{\mu^*}{Y} & -D_{\text{en}}(t) & 0 \\ -\left(\frac{\mu^*}{Y_{XO}} + b\right) & 0 & -(K_I a + D_{\text{en}}(t)) \end{bmatrix}.$$

Nótese que la matriz $F(t)$ puede escribirse como $F(t) = F_0 - D_{\text{en}}I$, donde F_0 es una matriz constante:

$$F_0 = \begin{bmatrix} \mu^* - K_d & 0 & 0 \\ -\frac{\mu^*}{Y} & 0 & 0 \\ -\left(\frac{\mu^*}{Y_{XO}} + b\right) & 0 & -K_I a \end{bmatrix}.$$

Dado que

$$\int_{t_0}^t D_{\text{en}}(\tau) d\tau = \int_{t_0}^t \frac{Q_{\text{en}}(\tau)}{V(\tau)} d\tau = \ln \left(\frac{V(t)}{V(t_0)} \right),$$

entonces

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t F(\tau) d\tau &= F_0 \cdot (t - t_0) - \left(\int_{t_0}^t D_{\text{en}}(\tau) d\tau \right) I \\ &= F_0 \cdot (t - t_0) + \ln \left(\frac{V(t_0)}{V(t)} \right) I. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Es fácil verificar que se cumple

$$F(t) \cdot \left(\int_{t_0}^t F(\tau) d\tau \right) = \left(\int_{t_0}^t F(\tau) d\tau \right) \cdot F(t),$$

y por lo tanto, la matriz de transición $\Phi(t, t_0)$ puede hallarse de la siguiente manera [6]:

$$\Phi(t, t_0) = \exp \left(\int_{t_0}^t F(\tau) d\tau \right). \quad (4.22)$$

Sustituyendo la ecuación (4.21) en (4.22),

$$\begin{aligned} \Phi(t, t_0) &= \exp \left(F_0 \cdot (t - t_0) + \ln \left(\frac{V(t_0)}{V(t)} \right) I \right) \\ &= \frac{V(t_0)}{V(t)} \exp (F_0 \cdot (t - t_0)). \end{aligned} \quad (4.23)$$

El grammiano de observabilidad se calcula entonces con

$$N(t_0, t_0 + \nu) = \int_{t_0}^{t_0 + \nu} \left[\frac{V(t_0)}{V(\tau)} \right]^2 [H e^{F_0 \cdot (\tau - t_0)}]^T [H e^{F_0 \cdot (\tau - t_0)}] d\tau.$$

En este sistema, $\frac{V(t_0)}{V(t)} \leq 1$ para todo $t \geq t_0$ y la matriz $N(t_0, t_0 + \nu)$ es positiva definida (los valores propios de una matriz simétrica son todos no negativos); por lo tanto se cumplen las siguientes desigualdades matriciales:

$$0 \leq N(t_0, t_0 + \nu) \leq \int_{t_0}^{t_0 + \nu} e^{F_0^T \cdot (\tau - t_0)} H^T H e^{F_0 \cdot (\tau - t_0)} d\tau \doteq W(t_0, t_0 + \nu), \quad (4.24)$$

El término de la izquierda es el grammiano de observabilidad para la pareja (F_0, H) y su valor resulta igual para cualquier t_0 . El siguiente teorema para sistemas lineales invariantes en el tiempo resulta útil en este caso:

Teorema 3 [6] *La pareja (A, C) resulta observable (completa y uniformemente) si y sólo si cualquiera de las siguientes condiciones se satisfacen:*

1. *Las columnas de Ce^{At} son linealmente independientes en $[0, \infty)$ sobre C , el campo de los números complejos;*
2. *El gramiano de observabilidad*

$$W_{0,t} \doteq \int_{t_0}^{t_0+\nu} e^{A^T \tau} C^T C e^{A \tau} d\tau$$

es no singular para cualquier $t > 0$;

3. *La matriz de observabilidad $\mathcal{O} \doteq [C, CA, CA^2, \dots, CA^{n-1}]^T$ es de rango n , donde n es el orden de la matriz A .*

Para la pareja (F_0, H) , la matriz de observabilidad es:

$$\mathcal{O} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -\left(\frac{\mu^*}{Y_{XO}} + b\right) & 0 & -K_l a \\ \left(\frac{\mu^*}{Y_{XO}} + b\right) [K_l a + K_d - \mu^*] & 0 & (K_l a)^2 \end{bmatrix}, \quad (4.25)$$

la cual es de rango $2 < n = 3$ para todo $t \in \mathfrak{R}$. Por lo tanto, usando el teorema anterior, la pareja (F_0, H) no es UCO para cualquier t , lo cual a su vez implica que $W(t_0, t_0 + \nu) \geq 0$ para cualquier t_0 y todo $\nu > 0$. Usando la desigualdad (4.24) se concluye que no se puede hallar un β_1 estrictamente mayor que cero en la desigualdad (4.12) de la definición 9 y por lo tanto la linealización alrededor de esta trayectoria singular no es UCO. $\diamond\diamond$

4.3 Diseño de observadores

Sea el sistema dinámico

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}), & \mathbf{x}(0) &= \mathbf{x}_0, \\ \mathbf{y} &= \mathbf{h}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (4.26)$$

cuyo estado es $\mathbf{x} \in D \subset \mathfrak{R}^n$, su entrada de control es $\mathbf{u} \in U \subset \mathfrak{R}^m$ y cuya salida es $\mathbf{y} \in \mathfrak{R}^p$. El estado inicial \mathbf{x}_0 es desconocido.

Considérese la siguiente definición de *observador de estados*:

Definición 11 [14] Un observador para (4.26) es un sistema dinámico

$$\begin{aligned}\dot{m} &= F(m, u, y), & m(0) &= m_0, \\ \hat{x} &= G(m),\end{aligned}\tag{4.27}$$

tal que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |x - \hat{x}| = 0$$

para todo $x_0 \in \mathcal{I}$, donde $\mathcal{I} \subset D \subset \mathbb{R}^n$.

Un observador estima los estados del sistema (4.26) con información de la salida y posiblemente de la entrada. El error de observación $e \doteq x - \hat{x}$ tiende a cero asintóticamente, lo cual implica que el estado estimado converge al estado real. Generalmente se busca que la región \mathcal{I} sea tan grande como sea posible e idealmente que $\mathcal{I} = D$, siendo D el dominio de definición.

En esta sección se analizarán algunos observadores para sistemas no lineales y su aplicabilidad al biorreactor aerobio estudiado. Es importante recalcar que la satisfacción de algún tipo de observabilidad no implica que se pueda construir un observador para el sistema, aunque sí puede ser una condición necesaria para la construcción de ciertos observadores. Para presentar algunos de ellos, primero se hará un bosquejo de la solución al problema de observación cuando el sistema es lineal e invariante en el tiempo.

4.3.1 Observadores para sistemas lineales invariantes en el tiempo

El problema de observación para sistemas lineales invariantes en el tiempo (LTI) ya ha sido resuelto si el sistema es (completa y uniformemente) observable y además se pueden medir las entradas. Considérese el sistema lineal

$$\begin{aligned}\dot{x} &= Ax + Bu, & x(0) &= x_0; \\ y &= Cx.\end{aligned}\tag{4.28}$$

Un observador para el sistema consiste en “copiar” la dinámica del sistema y adicionar un término corrector que dependa del error entre la salida real y la estimada. Es decir:

$$\begin{aligned}\dot{\hat{x}} &= A\hat{x} + Bu + K(y - \hat{y}), & \hat{x}(0) &= \hat{x}_0; \\ \hat{y} &= C\hat{x},\end{aligned}\tag{4.29}$$

donde la matriz K se diseña de tal manera que los valores propios de la matriz $A - KC$ tengan parte real negativa (que sea Hurwitz). A este observador se le conoce como de *observador de Luenberger*.

La dinámica del error de observación está dada por

$$\dot{e} = (A - KC)e, \quad e_0 = x(0) - \hat{x}(0). \quad (4.30)$$

Se puede ver que si $A - KC$ es Hurwitz, $e \rightarrow 0$ exponencialmente conforme $t \rightarrow \infty$. Por lo tanto cualquiera que sea el error de observación inicial, los estados estimados convergen a los reales, aún si el sistema es inestable. La rapidez de convergencia está dada por los valores propios de la matriz $A - KC$. Si el sistema es observable, éstos se pueden asignar arbitrariamente mediante una selección adecuada de la matriz K .

4.3.2 Observadores para sistemas no lineales

Un gran número de observadores para sistemas no lineales se basa en una idea similar a la empleada por el observador de Luenberger; esto es, un sistema dinámico que copia la dinámica del sistema o una parte de ella y un término corrector que es cero cuando el error de observación también es cero. Otra estrategia de diseño se basa en emplear un sistema dinámico de menor orden que el sistema original aprovechando que parte del estado puede ser medido.

Filtro de Kalman extendido

Para sistemas lineales el filtro de Kalman es ampliamente usado como observador [11]. Considérese el sistema dinámico lineal de dimensión finita

$$\begin{aligned} \dot{x} &= Ax + Bu + Gw \\ y &= Cx + v \end{aligned}$$

donde w y v son ruidos blancos, independientes entre sí, con media cero y matrices de covarianza Q y R ; es decir

$$\begin{aligned} E\{ww^T\} &= R, \quad E\{w\} = 0, \\ E\{vv^T\} &= Q, \quad E\{v\} = 0, \\ E\{vw^T\} &= 0. \end{aligned}$$

El filtro de Kalman realiza un filtrado del proceso estocástico de la salida para obtener un estimado óptimo del estado real. Su estructura es:

$$\dot{\hat{x}} = A\hat{x} + Bu + K(y - C\hat{x}),$$

donde la matriz K , si el sistema es invariante en el tiempo, se encuentra resolviendo la siguiente ecuación algebraica de Riccati para P :

$$AP + PA^T + GQG^T - PC^T R^{-1} CP = 0.$$

Usando este resultado se calcula

$$K = PC^T R^{-1}.$$

La matriz P es la matriz de covarianza del error de estimación $e = x - \hat{x}$; es decir $P = E\{ee^T\}$. Nótese que si los ruidos w y v están bien caracterizados y las matrices de covarianza Q y R son conocidas, el problema ya está resuelto. Sin embargo, lo que se busca es un observador que estime los estados reales del sistema determinístico (4.28) a partir de mediciones de la salida. Se observa que la única diferencia entre la estructura de este filtro y la del observador de Luenberger es cómo se calcula la matriz K . El filtro de Kalman, por lo tanto, puede usarse como observador, usando las matrices R y Q como parámetros de diseño para darle más o menos peso a la estimación de ciertos estados o a la influencia de ciertas salidas.

Este mismo filtro puede usarse como un observador local alrededor de una trayectoria si la linealización del sistema alrededor de ésta es observable en t_0 y constituye lo que se conoce como filtro de Kalman extendido (EKF por sus siglas en inglés) [11]. Si además las linealizaciones alrededor de *cualquier* trayectoria son completa y uniformemente observables (observabilidad LU-CO), entonces la tasa de convergencia del error de observación a cero puede ser asignada arbitrariamente [8]. Dado el sistema (4.26) y su linealización alrededor de una trayectoria, la estructura de este observador es la siguiente:

$$\dot{\hat{x}} = f(\hat{x}, u) + K(t)[y - h(x)] \quad (4.31)$$

con

$$K(t) = P(t)H^T(\hat{x})R^{-1} \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} \dot{P}(t) = & F(\hat{x}, u)P(t) + P(t)F^T(\hat{x}, u) + Q \\ & - P(t)H^T(\hat{x})R^{-1}H(\hat{x})P(t) \end{aligned} \quad (4.33)$$

donde las matrices $F(\hat{x}, u)$ y $H(\hat{x})$ están dadas por

$$F(\hat{x}, u) = \left[\frac{\partial f(x, u)}{\partial x} \right]_{x=\hat{x}} \quad \text{y} \quad H(\hat{x}) = \left[\frac{\partial h(x)}{\partial x} \right]_{x=\hat{x}}$$

Nuevamente las matrices Q y R pueden usarse como parámetros de diseño. Nótese que en este caso la linealización se hace alrededor de la trayectoria de los estados estimados y las matrices $P(t)$ y $K(t)$ resultan variantes en el tiempo.

Este observador puede usarse para el sistema del biorreactor aerobio estudiado. La matriz F está dada por la ecuación (4.20) evaluada en $x = \hat{x}(t)$ y $H = [0, 0, 1]$. Las matrices Q y R se escogen de tal manera que la estimación sea tan rápida como sea posible sin que las trayectorias de los estados estimados se alejen demasiado de los estados reales.

Se ha demostrado que la linealización alrededor de la trayectoria singular generada por Q_{sing} , cuando $S_0 = S^*$, no es UCO y por lo tanto el sistema no lineal no es LUCO. Pero físicamente esta trayectoria no puede seguirse para siempre. Cuando el reactor llega al volumen final (cuando $V(t) = V_f$), el flujo de entrada debe ser cero, haciendo que la linealización alrededor de cualquier trayectoria admisible sí pueda llegar a ser UCO. Considérese, sin embargo, el momento en que se sigue la trayectoria singular; como la linealización no es UCO, entonces por lo menos mientras los estados permanezcan en este arco singular, la tasa de convergencia del error de observación a cero no puede ser asignada arbitrariamente.

Otra desventaja de este observador es que tan sólo resulta local; es decir, la convergencia se asegura sólo si el estado inicial estimado es suficientemente cercano al real.

Observador de alta ganancia

Considérese el sistema MISO afín en la entrada dado por la ecuación (4.4). Si es uniformemente observable para toda entrada, entonces la transformación (4.6) es un difeomorfismo global y las ecuaciones diferenciales que lo describen en las nuevas coordenadas están dadas por [10]:

$$\begin{aligned} \dot{z} &= \begin{bmatrix} \dot{z}_1 \\ \dot{z}_2 \\ \vdots \\ \dot{z}_{n-1} \\ \dot{z}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_n \\ \varphi(z) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1(z_1) \\ b_2(z_1, z_2) \\ \vdots \\ b_n(z_1, z_2, \dots, z_n) \end{bmatrix} u, \\ y &= z_1, \end{aligned}$$

lo cual puede escribirse en forma compacta como

$$\begin{aligned} \dot{z} &= Az + \varphi(z) + B(z)u, & z_0 &= T(x(0)) \\ y &= Cz, \end{aligned} \quad (4.34)$$

donde $\varphi(z) \doteq [0, 0, \dots, \varphi(z)]^T$, $C = [1, 0, \dots, 0]$ y $A_{i,j} = \delta_{i,j-1}$; es decir

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}.$$

El diseño del observador se hace en las nuevas coordenadas. El par (A, C) siempre es observable y se puede diseñar una matriz K tal que $A - KC$ sea Hurwitz y los valores propios sean el conjunto arbitrario $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$. Sea $K = [k_1, k_2, \dots, k_n]^T$. Defínase $K^*(\theta) = [\theta k_1, \theta^2 k_2, \dots, \theta^n k_n]^T$; entonces los valores propios de $A - K^*(\theta)C$ son el conjunto $\{\theta\lambda_1, \theta\lambda_2, \dots, \theta\lambda_n\}$.

Para θ suficientemente grande, si u es uniformemente acotada, entonces

$$\dot{\hat{z}} = A\hat{z} + \varphi(\hat{z}) + B(z)u + K^*(\theta)[y - C\hat{z}], \quad \hat{z}_0 = T(\hat{x}(0)) \quad (4.35)$$

es un observador exponencial del sistema (4.34) [7].

Dado que $z = T(x)$, se tiene que $\dot{z} = [\partial T(x)/\partial x]x$ y por lo tanto el observador en las coordenadas originales es:

$$\dot{\hat{x}} = f(\hat{x}) + \sum_{j=1}^m g_j(\hat{x})u_j + \left[\frac{\partial T(x)}{\partial x} \right]_{x=\hat{x}}^{-1} K^*(\theta)[y - h(\hat{x})], \quad \hat{x}(0) = \hat{x}_0. \quad (4.36)$$

El sistema del biorreactor aerobio estudiado no es ni completa ni uniformemente observable. La transformación definida por la ecuación (4.6) no es difeomórfica, ya que una condición necesaria para que una transformación sea un difeomorfismo es que su jacobiano sea no singular en todo punto $x \in D$ [15], y efectivamente esto no se cumple para el sistema estudiado porque existe una superficie en el espacio de estados donde

$$\left| \frac{\partial T(x)}{\partial x} \right| = 0. \quad (4.37)$$

La transformación en este caso es:

$$T \left(\begin{bmatrix} X \\ S \\ O \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} O \\ -\frac{\mu(S)}{Y_{XO}}X - bX + K_I a(O_s - O) \\ -\frac{\mu(S)}{Y_{XO}}X \left(\mu(S) - \frac{\mu'(S)}{Y}X - K_I a \right) - \\ K_I a^2(O_s - O) - bX(\mu(S) - K_I a) \end{bmatrix} \quad (4.38)$$

Al calcular el determinante del jacobiano e igualarlo a cero se obtiene la siguiente expresión que define una superficie en \mathfrak{R}^3 donde el mapa no es invertible:

$$(\mu + bY_{XO}) [Y(\mu + bY_{XO})\mu' - X\mu\mu''] + X(\mu - bY_{XO})\mu'^2 = 0, \quad (4.39)$$

donde $\mu := \mu(S)$, $\mu' := \frac{d}{dS}\mu(S)$ y $\mu'' := \frac{d^2}{dS^2}\mu(S)$.

Observador asintótico

Un observador específico para biorreactores es el propuesto por Bastin y Dochain [2]. Considérese un modelo dinámico general para biorreactores que involucra n componentes y m reacciones:

$$\dot{\xi} = K\phi(\xi) - D_{en}\xi + \mathbf{F} - \mathbf{Q}, \quad (4.40)$$

donde $\xi \in \mathfrak{R}_+^n$ es el vector de componentes involucrados en la reacción (estados); $\phi(\xi) \in \mathfrak{R}_+^m$ es un vector de tasas de crecimiento; K es una matriz de $n \times m$ de coeficientes de conversión; $D_{en} \in \mathfrak{R}$ es la tasa de dilución de entrada; $\mathbf{F} \in \mathfrak{R}_+^n$ es el vector de flujos másicos de entrada de cada componente; y $\mathbf{Q} \in \mathfrak{R}_+^n$ es el vector de flujo másico de salida de cada componente en forma gaseosa.

Este modelo posee una propiedad estructural útil en el diseño de un observador asintótico. Sean $p = \rho(K)$ el rango de la matriz K , K_a una submatriz arbitraria de K de $p \times m$ de rango completo, K_b la submatriz restante de K , y $[\xi_a, \xi_b]^T$, $[\mathbf{Q}_a, \mathbf{Q}_b]^T$ y $[\mathbf{F}_a, \mathbf{F}_b]^T$ las particiones de ξ , \mathbf{Q} y \mathbf{F} correspondientemente. El sistema puede reescribirse como:

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_a &= K_a\phi(\xi_a, \xi_b) - D_{en}\xi_a + \mathbf{F}_a - \mathbf{Q}_a, \\ \dot{\xi}_b &= K_b\phi(\xi_a, \xi_b) - D_{en}\xi_b + \mathbf{F}_b - \mathbf{Q}_b. \end{aligned}$$

Existe entonces la transformación de estados

$$\mathbf{Z} = A_0 \boldsymbol{\xi}_a + \boldsymbol{\xi}_b, \quad (4.41)$$

donde A_0 (de $(n-p) \times p$) es la solución única de la ecuación matricial

$$A_0 K_a + K_b = 0, \quad (4.42)$$

tal que el modelo anterior es equivalente a

$$\dot{\boldsymbol{\xi}}_a = K_a \phi(\boldsymbol{\xi}_a, \boldsymbol{\xi}_b) - D_{\text{en}} \boldsymbol{\xi}_a + \mathbf{F}_a - \mathbf{Q}_a, \quad (4.43)$$

$$\dot{\mathbf{Z}} = -D_{\text{en}} \mathbf{Z} + A_0 (\mathbf{F}_a - \mathbf{Q}_a) + (\mathbf{F}_b - \mathbf{Q}_b). \quad (4.44)$$

La utilidad de hacer esta transformación radica en que el estado \mathbf{Z} no depende de las tasas de crecimiento $\phi(\boldsymbol{\xi})$. También puede buscarse seleccionar K_a tal que $\mathbf{F}_a - \mathbf{Q}_a = 0$ y entonces también resulte independiente de los coeficientes de conversión.

Sean $\boldsymbol{\xi}_1$ y $\boldsymbol{\xi}_2$ los vectores de componentes medidos y no medidos, respectivamente. El vector \mathbf{Z} también puede escribirse como una combinación de ellos:

$$\mathbf{Z} = A_1 \boldsymbol{\xi}_1 + A_2 \boldsymbol{\xi}_2 \quad (4.45)$$

Considérese que la matriz A_2 tiene al menos una inversa izquierda A_2^+ (si es no singular $A_2^+ = A_2^{-1}$) y que \mathbf{F} y \mathbf{Q} son medibles. Un observador asintótico para el sistema (4.40) es:

$$\dot{\hat{\mathbf{Z}}} = -D_{\text{en}} \hat{\mathbf{Z}} + A_0 (\mathbf{F}_a - \mathbf{Q}_a) + (\mathbf{F}_b - \mathbf{Q}_b), \quad (4.46)$$

$$\hat{\boldsymbol{\xi}}_2 = A_2^+ (\hat{\mathbf{Z}} - A_1 \boldsymbol{\xi}_1). \quad (4.47)$$

Este observador es de orden reducido, ya que no se estiman todos los estados, sino sólo aquellos que no se pueden medir. Para hallar la dinámica del error de observación $\mathbf{e} \doteq \boldsymbol{\xi}_2 - \hat{\boldsymbol{\xi}}_2$, nótese que $\boldsymbol{\xi}_2 = A_2^+ (\mathbf{Z} - A_1 \boldsymbol{\xi}_1)$, y de (4.44), (4.46) y (4.47) se obtiene que:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{e}} &= \dot{\boldsymbol{\xi}}_2 - \dot{\hat{\boldsymbol{\xi}}}_2 \\ &= A_2^+ (\dot{\mathbf{Z}} - A_1 \dot{\boldsymbol{\xi}}_1) - A_2^+ (\dot{\hat{\mathbf{Z}}} - A_1 \dot{\boldsymbol{\xi}}_1) = A_2^+ (\dot{\mathbf{Z}} - \dot{\hat{\mathbf{Z}}}) \\ &= -A_2^+ D_{\text{en}} (\mathbf{Z} - \hat{\mathbf{Z}}) = -D_{\text{en}} A_2^+ [(A_1 \boldsymbol{\xi}_1 + A_2 \boldsymbol{\xi}_2) - (A_1 \boldsymbol{\xi}_1 + A_2 \hat{\boldsymbol{\xi}}_2)] \\ &= -D_{\text{en}} \mathbf{e} \end{aligned} \quad (4.48)$$

Es claro que la rapidez de convergencia del observador depende de la tasa de dilución. Si ésta es de excitación persistente se garantiza la convergencia del estado estimado al real. Si es cero, el error de observación permanece constante.

Las ecuaciones (4.1) a (4.3) del biorreactor aerobio se pueden escribir como en la ecuación (4.40) haciendo

$$\phi(\xi) = \mu(S)X, \quad \xi = \begin{bmatrix} X \\ S \\ O \end{bmatrix}, \quad K = \begin{bmatrix} 1 \\ -1/Y \\ -1/Y_{XO} \end{bmatrix}, \quad y$$

$$F - Q = \begin{bmatrix} -K_d X \\ S_{en} D_{en} \\ O_{en} D_{en} + K_l a (O_s - O) - bX \end{bmatrix}.$$

La partición se puede hacer tal que $K_a = 1$ y $K_b = [-1/Y, -1/Y_{XO}]^T$. Entonces $A_0 = [1/Y, 1/Y_{XO}]^T$. El estado medido es $\xi_1 = O$ y por lo tanto $\xi_2 = [X, S]^T$. Sin embargo no se cumple con la condición de que $F - Q$ sea medible, ya que gracias a b y K_d , depende de los estados a estimar.

A pesar de ello, una propuesta de observador es:

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \hat{Z}_1 \\ \hat{Z}_2 \end{bmatrix} = -D_{en} \begin{bmatrix} \hat{Z}_1 \\ \hat{Z}_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} S_{en} D_{en} \\ O_{en} D_{en} + K_l a (O_s - O) - b\hat{X} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1/Y \\ 1/Y_{XO} \end{bmatrix} K_d \hat{X} \quad (4.49)$$

$$\begin{bmatrix} \hat{X} \\ \hat{S} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & Y_{XO} \\ 1 & -Y_{XO}/Y \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} \hat{Z}_1 \\ \hat{Z}_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} O \right). \quad (4.50)$$

El error de observación $e = \xi_2 - \hat{\xi}_2$ en este caso está dado por:

$$\dot{e} = -D_{en} e + \begin{bmatrix} -K_d - bY_{XO} & 0 \\ bY_{XO}/Y & 0 \end{bmatrix} e, \quad (4.51)$$

lo cual indica que la dinámica del error de observación es inestable cuando $b > 0$ y $D_{en} = 0$. Incluso si $b = 0$ y $K_d = 0$, entonces $F - Q$ es medible y el error de observación se comporta como en la ecuación (4.48). En las fases de llenado y reacción, como ya se ha visto (véase la ecuación (2.15) de la sección 2.3.1),

$$\int_0^{T_r} D_{en} dt = \int_0^{T_r} \frac{Q_{en}}{V} dt = \ln \left(\frac{V_f}{V_0} \right),$$

donde T_r es el tiempo que duran las fases de llenado y reacción, V_0 es el volumen al inicio y V_f el volumen al final de la fase. Por lo tanto el error al final de la reacción sería:

$$e_f = e_0 \exp\left(-\int_0^{T_r} D_{en} dt\right) = e_0 \exp\left(-\ln\left(\frac{V_f}{V_0}\right)\right) = \frac{V_0}{V_f} e_0, \quad (4.52)$$

lo cual no resulta adecuado si el error inicial es grande y la relación entre los volúmenes inicial y final es pequeña.

Observador por modos deslizantes

Los observadores mencionados anteriormente tienen la desventaja de que dependen del conocimiento exacto de los parámetros de la planta. Para robustificar el comportamiento asintótico del observador se plantean técnicas basadas en sistemas de estructura variable o de modos deslizantes. Un observador de este tipo se explica a continuación [27]:

Sea la clase de sistemas no lineales del tipo

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}}(t) &= A\mathbf{x}(t) + \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) + B\mathbf{u}(t) & \mathbf{x}(0) &= \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{y}(t) &= C\mathbf{x}(t) \end{aligned} \quad (4.53)$$

donde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$ y $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$. La función $\mathbf{f}(\cdot, \cdot, \cdot)$ se puede interpretar como las no linealidades y/o las incertidumbres en el sistema.

Supóngase que para (4.53) se cumple lo siguiente:

1. El par (A, C) es detectable; es decir, existe K tal que $A - KC$ es Hurwitz.
2. Existen una matriz $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ positiva definida y una función $\eta(\cdot, \cdot, \cdot) : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^+ \mapsto \mathbb{R}^p$ tal que:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = P^{-1}C^T\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t), \quad (4.54)$$

donde P es la única solución positiva definida de la ecuación de Lyapunov

$$(A - KC)^T P + P(A - KC) = -Q. \quad (4.55)$$

3. Existe una función escalar $\rho(\cdot, \cdot) : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^+ \mapsto \mathbb{R}^1$ tal que:

$$\|h(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)\| \leq \rho(\mathbf{u}, t) \quad (4.56)$$

La condición dada por (4.54) restringe la estructura de las no linealidades. Dado que las demás matrices son constantes, la solución de la ecuación de Lyapunov también lo es. Definiendo $W \doteq P^{-1}C^T$, las condiciones anteriores se reducen a que la función de transferencia $G(s) = C(sI - A + KC)^{-1}W$ sea estrictamente positiva real (SPR) [15] y que exista una cota para las no linealidades.

El observador propuesto es exponencial y el error de observación es finalmente acotado. Su estructura considerando una capa límite (*boundary layer*) es la siguiente [27]:

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}} = A\hat{\mathbf{x}} + K(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{x}}) + S(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{y}, \rho) \quad (4.57)$$

donde si se define $\mathbf{e}(t) = \hat{\mathbf{x}}(t) - \mathbf{x}(t)$,

$$S(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{y}, \rho) = \begin{cases} \frac{-P^{-1}C^T C e \rho}{\|C e \rho\|} \rho & \text{si } \|C e \rho\| > \epsilon \\ \frac{-P^{-1}C^T C e \rho}{\epsilon} \rho & \text{si } \|C e \rho\| \leq \epsilon \end{cases} \quad (4.58)$$

Para el biorreactor estudiado la pareja (A, C) no es observable, pero se puede modificar para que lo sea. Defínanse

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \doteq \begin{bmatrix} VX \\ VS \\ V(O - O_s) \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} \doteq \begin{bmatrix} Q_{\text{en}} \\ V \end{bmatrix}.$$

Escójase un vector $\mathbf{a} = [a_1, a_2, a_3]^T$ diferente de cero. Entonces:

$$A = \begin{bmatrix} -K_d + a_1 & a_2 & a_3 \\ -\frac{a_1}{Y} & -\frac{a_2}{Y} & -\frac{a_2}{Y} \\ -b - \frac{a_1}{Y_{XO}} & -\frac{a_2}{Y_{XO}} & -K_l a - \frac{a_3}{Y_{XO}} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1 \\ -1/Y \\ -1/Y_{XO} \end{bmatrix} \left(x_1 \mu \left(\frac{x_2}{u_2} \right) - \mathbf{a}^T \mathbf{x} \right), \quad \text{y} \quad B = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ S_{\text{en}} & 0 \\ O_{\text{en}} - O_s & 0 \end{bmatrix}.$$

El vector \mathbf{a} puede escogerse tal que la nueva pareja (A, C) sea observable. En este caso

$$\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = x_1 \mu \begin{pmatrix} x_2 \\ u_2 \end{pmatrix} - \mathbf{a}^T \mathbf{x}$$

y por lo tanto

$$W \doteq P^{-1}C^T = \left[1, -\frac{1}{Y}, -\frac{1}{Y_{XO}} \right]^T.$$

Sin embargo la función de transferencia $G(s) = C(sI - A + KC)^{-1}W$ nunca puede ser SPR, ya que independientemente de los valores de \mathbf{a} o de K , sus ceros están dados por las raíces del polinomio

$$z(s) = s(s + K_d + bY_{XO}),$$

una de las cuales es cero y la otra es cercana a cero para los valores de los parámetros empleados. Esto implica que el sistema $G(s)$ puede ser cuando mucho, sólo positivo real, y un polo debe estar situado entre $s = 0$ y $s = -(K_d + bY_{XO})$, forzando a la dinámica del sistema a ser demasiado lenta para los propósitos perseguidos y no garantizando la convergencia asintótica del error de observación a cero.

4.4 Sumario

Se estudió la observabilidad del biorreactor aerobio para las fases de llenado y reacción (véanse las ecuaciones (4.1) a (4.3)). El sistema es observable, pero no es completa ni uniformemente observable.

Se revisaron diferentes técnicas de diseño de observadores y se evaluó su aplicabilidad al sistema. Es posible emplear el filtro de Kalman extendido como observador, pero su dinámica no puede ser asignada arbitrariamente durante una parte de algunas trayectorias admisibles. El observador de alta ganancia no es estrictamente aplicable al biorreactor, ya que requiere que el sistema sea uniformemente observable para toda entrada. El observador asintótico puede usarse mientras la entrada sea mayor que cero y K_d y b sean nulas, pero el error de observación para entradas admisibles nunca puede ser cero; si $K_d > 0$ ó $b > 0$, los estados estimados incluso pueden diverger de los reales al final de la fase de reacción. El observador por modos deslizantes probado no puede ser empleado como observador de este sistema, ya que no se puede asegurar la convergencia asintótica de los estados estimados a los reales.

Capítulo 5

Resultados y discusión

En este capítulo se presentan y discuten los resultados obtenidos con la estrategia de control de tiempo óptimo con observador. Primero se presenta una validación del modelo matemático para ciertos parámetros del modelo matemático empleado, comparando las respuestas simulada y real. Posteriormente se presentan los resultados obtenidos mediante simulaciones para verificar que la ley de control es efectivamente de tiempo óptimo. Después se hace una comparación de los observadores, tanto en lazo abierto como cerrado, para evaluar su comportamiento y verificar lo afirmado en el capítulo anterior. Finalmente se presentan los resultados experimentales obtenidos usando uno de los observadores y la estrategia de control de tiempo óptimo.

5.1 Validación del modelo matemático

La planta experimental correspondió a un biorreactor piloto de laboratorio de 7 litros. Se intercambiaron 4 litros y el flujo de entrada correspondió a agua residual sintética con una alta concentración de 4-clorofenol. Se usaron lodos aclimatados para este propósito. Los flujos de entrada y salida de agua podían ser controlados mediante bombas peristálticas directamente desde una computadora. Se contaba con un oxímetro digital, cuya lectura podía también hacerse mediante la computadora en forma continua. Mediante técnicas de laboratorio fuera de línea podían calcularse indirectamente las concentraciones de biomasa total (microorganismos) y de sustrato (4-clorofenol) en el seno del reactor. Los parámetros se hallaron empleando distintas técnicas y se muestran en la tabla 5.1.

Tabla 5.1: Parámetros del biorreactor

$V_{\max} = 7.0$ [l]	$V_{\min} = 3.0$ [l]	$Q_{\max} = 100$ [l/h]
$\mu_0 = 0.02$ [1/h]	$K_S = 20$ [mg/l]	$K_I = 31$ [mg/l]
$K_I a = 18$ [1/h]	$b = 0.004$ [1/h]	$K_d = 0.01$ [1/h]
$S_{\min} = 0.5$ [mg/l]	$Y = 0.3$	$Y_{X0} = 0.85$
$S_{\text{en}} = 175$ [mg/l]	$O_{\text{sat}} = 7.0$ [mg/l]	$O_{\text{en}} = 0$ [mg/l]

Para validar el modelo matemático se operó al reactor como SBR y se compararon las respuestas obtenidas mediante simulación con aquellas obtenidas experimentalmente. Esta comparación también sirvió para ajustar algunos parámetros y se muestra en la figura 5.1 para las concentraciones de sustrato y oxígeno.

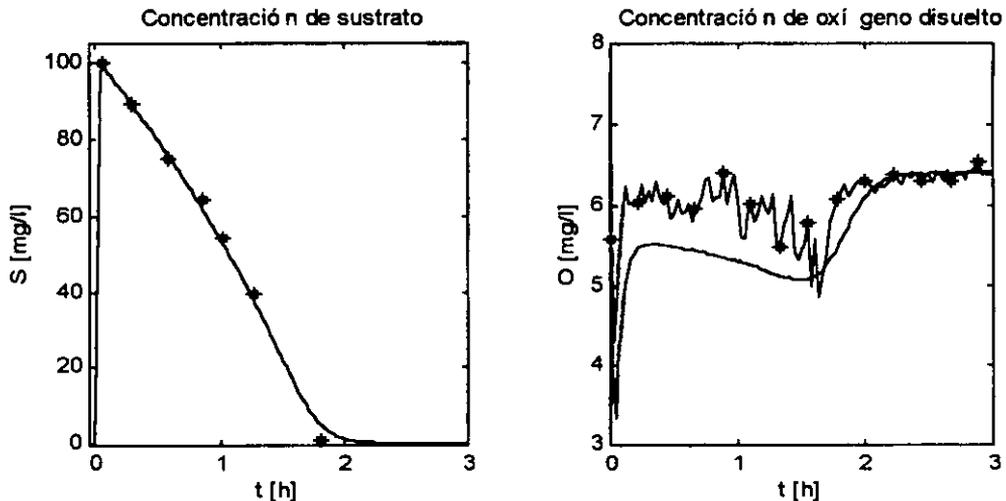


Figura 5.1: Comparación entre las respuestas de simulación (—) y experimental (*,-*) para las concentraciones de sustrato S y oxígeno disuelto O (los datos experimentales de $O(t)$ son continuos; los de $S(t)$ no lo son).

Como se aprecia, aunque las respuestas no son idénticas, sí son similares, lo cual implica que el modelo matemático empleado es adecuado y representa, al menos estructuralmente, la dinámica de la planta.

5.2 Optimalidad del controlador

Para ilustrar la optimalidad del controlador, considérese una medición completa del vector de estado y compárense los resultados que se obtienen usando el controlador óptimo y usando una estrategia usual de tipo SBR; esto es, llenando el reactor con el flujo máximo y esperando que se degrade el sustrato.

Se simuló al sistema en una computadora personal usando MATLAB con SIMULINK. Esto se observa en la figura 5.2 con las siguientes condiciones iniciales:

$$X_0 = 6300 \text{ [mg/l]} \quad S_0 = 0.5 \text{ [mg/l]} \quad O_0 = 7.0 \text{ [mg/l]} \quad V_0 = 3.0 \text{ [l]} \quad (5.1)$$

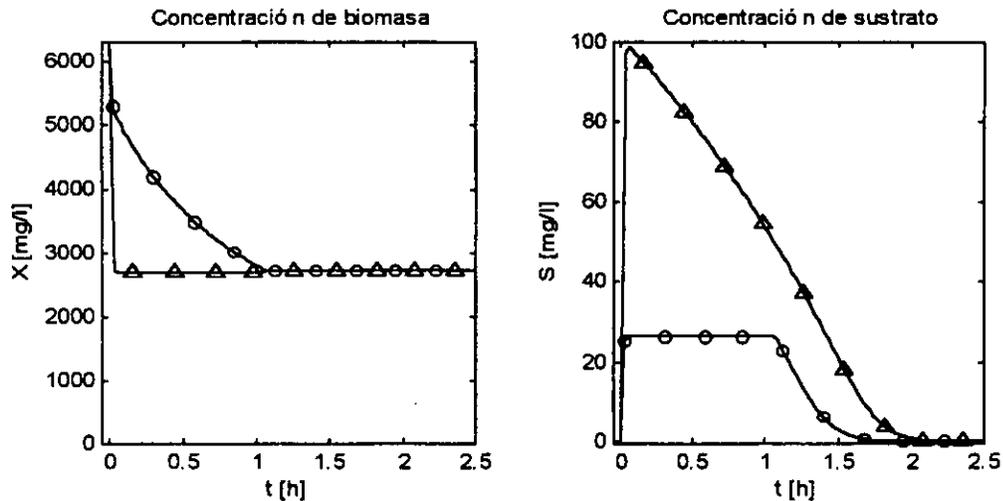


Figura 5.2: Evolución de las concentraciones de sustrato S y biomasa X cuando se usan el controlador óptimo (\circ) y la estrategia usual (Δ) y $S_{en} = 175 \text{ [mg/l]}$.

El controlador óptimo, como puede observarse, reduce el tiempo de la reacción. La estrategia usual tarda 2.128 [h] en degradar el sustrato a una concentración menor que $S_{\min} = 0.5 \text{ [mg/l]}$, mientras que con el control óptimo sólo tarda 1.774 [h]: una reducción del 16.64%. Esto incluso es más evidente con una mayor concentración de sustrato de entrada y se muestra en la figura 5.3 para $S_{en} = 350 \text{ [mg/l]}$. Las duraciones de la reacción son de 5.718 [h] y 3.280 [h] respectivamente, lo que equivale a una reducción del

42.64%. Con la estrategia de tipo SBR existe mayor inhibición y menor crecimiento de microorganismos al inicio de la fase de reacción; la concentración de sustrato es prácticamente $S = S_{en} \left(\frac{V_f}{V_0}\right)$. En cambio, con la estrategia de control óptimo, la concentración de sustrato se mantiene en $S = S^*$, independientemente de la concentración en el influente; el llenado, sin embargo, es más lento (véase la ecuación (3.15)).

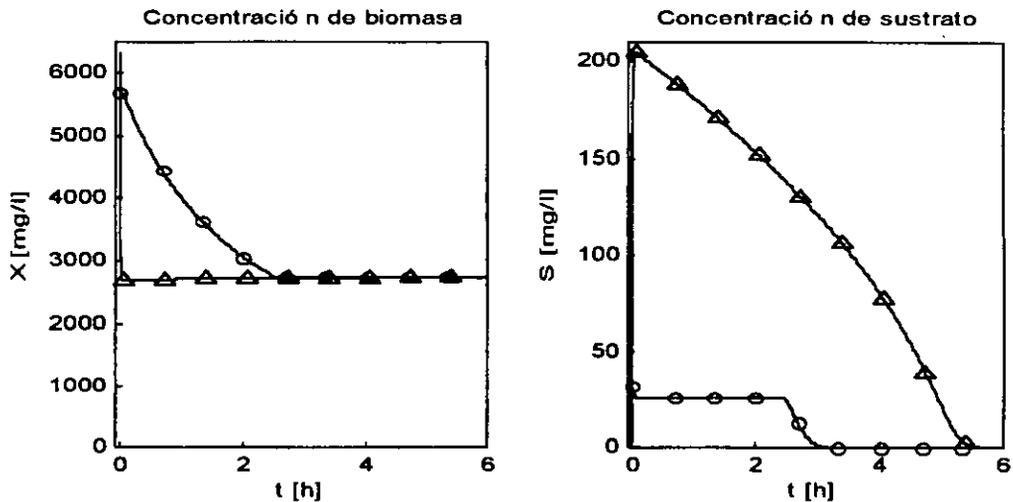


Figura 5.3: Evolución de las concentraciones de sustrato S y biomasa X cuando se usan el controlador óptimo (o) y la estrategia usual (Δ) y $S_{en} = 350$ [mg/l].

La evolución en el tiempo del volumen en el biorreactor se muestra comparativamente en la figura 5.4. El flujo de entrada demandado por el controlador óptimo se muestra en la figura 5.5¹. Estas dos figuras corresponden a las simulaciones cuando $S_{en} = 175$ [mg/l].

5.3 Comparación de observadores no lineales en simulación

En esta sección se analizan los resultados de simulación para algunos de los observadores no lineales presentados en la sección 4.3.2. Se probaron el filtro

¹La figura está recortada para apreciarse mejor: los picos no visibles corresponden al flujo máximo $Q_{max} = 100$ [l/h].

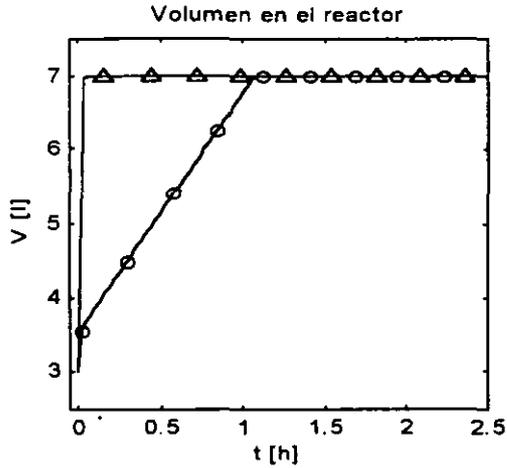


Figura 5.4: Evolución del volumen con el controlador óptimo (o) y la estrategia usual (Δ).

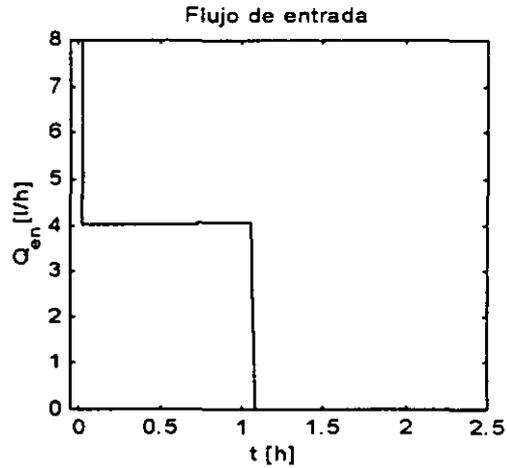


Figura 5.5: Evolución del flujo de entrada cuando se usa el controlador óptimo.

de Kalman extendido (EKF), el observador de alta ganancia y el observador asintótico.

5.3.1 Observadores en lazo abierto

Los observadores primero se ajustaron utilizándolos en lazo abierto; es decir, estimando los estados, pero sin usarlos en el controlador. Se requiere que esta estimación sea suficientemente rápida, para que el controlador óptimo pueda usarlos sin perder demasiada optimalidad en la degradación. Es importante estimar adecuadamente tanto la concentración de biomasa X como la de sustrato S , ya que de la primera depende el valor del flujo singular Q_{sing} y de la correcta estimación de la segunda depende la decisión de qué trayectoria de control seguir (véase la ley de control (3.14)).

El ajuste de los parámetros de diseño en cada caso se hizo heurísticamente a partir de varias simulaciones. Para el EKF se ajustaron las matrices $P_0 = P_0^T > 0$, $Q = Q^T > 0$ y $R > 0$.

En el observador de alta ganancia, los parámetros a ajustar fueron θ y los valores propios de $A - KC$ mediante una selección adecuada de la matriz K . En este caso los tres valores propios se escogieron tales que:

$$\lambda[A - K^*C] = \{-\theta, -\theta(\cos \alpha + j \sin \alpha), -\theta(\cos \alpha - j \sin \alpha)\},$$

quedando sólo dos parámetros a ajustar: θ y α . Para poder llevar a cabo la implantación de este observador, debió considerarse la superficie (4.39) donde el jacobiano de la transformación (4.38) es no invertible, para evitarla cuando los estados estimados se encontraran cercana a ella.

En el observador asintótico no hay necesidad de ajustar parámetros una vez hecha la selección de las matrices K_a y K_b , puesto que no se tiene control sobre la rapidez de la convergencia del error de observación a cero.

En la figura 5.6 se muestra el desempeño de los tres observadores en lazo abierto para estimar S y X con tres condiciones iniciales distintas, las cuales aparecen en la tabla 5.2. Los parámetros de diseño empleados se muestran en la tabla 5.3. La planta "real" (en simulación) inicia en las mismas condiciones que las mostradas en (5.1).

Tabla 5.2: Condiciones iniciales de los observadores:

$$\mathbf{x}_0 = [\hat{X}_0, \hat{S}_0, \hat{O}_0]^T$$

Condición inicial #1:	$\hat{\mathbf{x}}_0 = [6400, 1.5, 6.8]^T$
Condición inicial #2:	$\hat{\mathbf{x}}_0 = [6150, 7.0, 6.5]^T$
Condición inicial #3:	$\hat{\mathbf{x}}_0 = [7000, 15.0, 6.0]^T$

Tabla 5.3: Parámetros de diseño de los observadores

Observador	Parámetros
Filtro de Kalman extendido:	$P_0 = \text{diag}(0.01, 0.01, 0.01)$, $Q = \text{diag}(50, 400, 200)$, $R = 0.5$;
Observador de alta ganancia:	$\theta = 5$, $\alpha = 15^\circ$
Observador asintótico:	ninguno

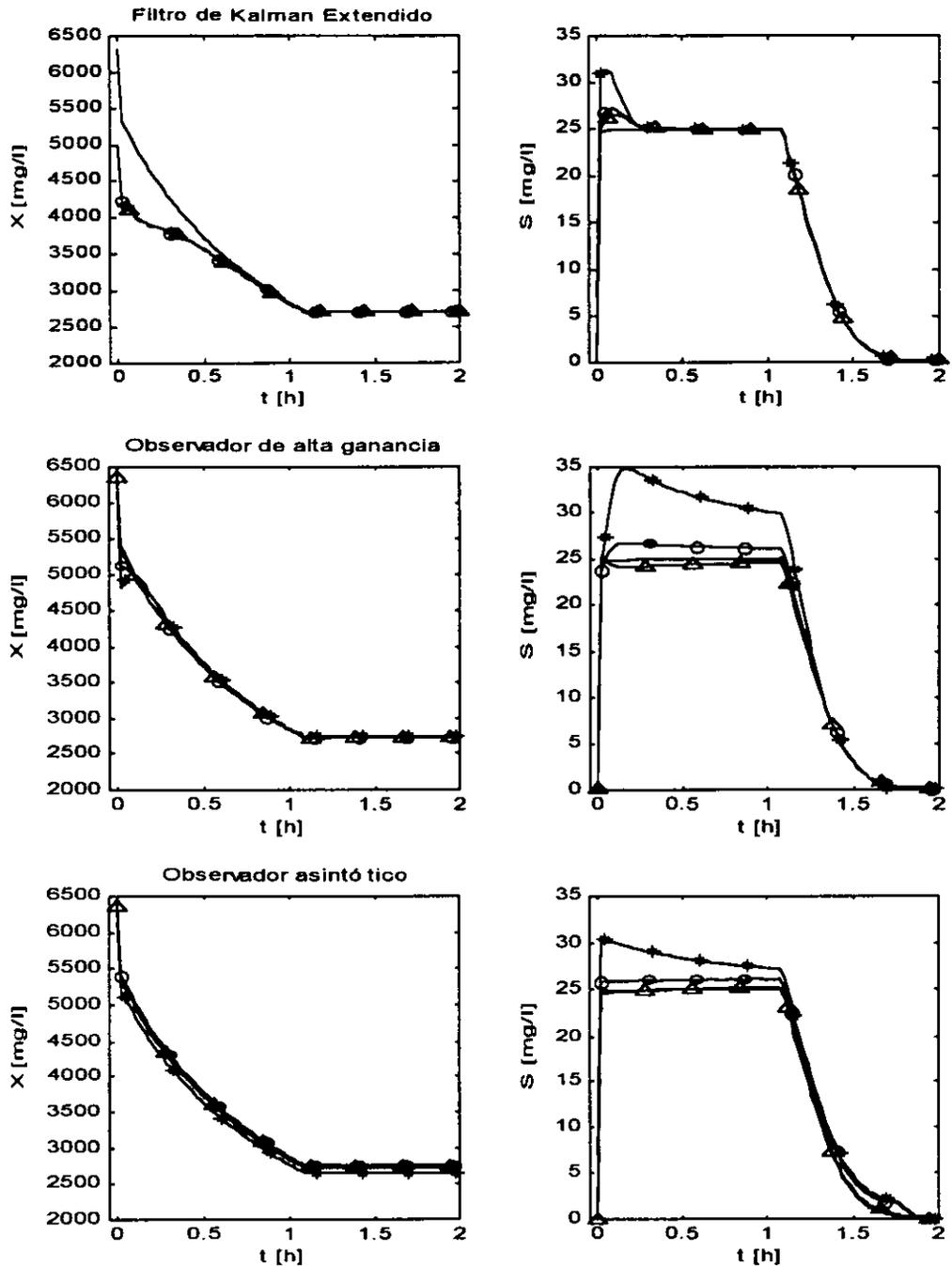


Figura 5.6: Estimación de S y X con observadores en lazo abierto para tres condiciones iniciales: #1 (Δ), #2 (\circ) y #3 ($*$); valor real (—).

Como puede observarse, en los tres observadores el error de observación converge rápidamente a cero cuando las condiciones iniciales del observador son suficientemente cercanas al valor real y los parámetros del observador son idénticos a los nominales. Sin embargo, para condiciones iniciales más alejadas de las reales, la convergencia del error a cero puede tomar gran parte del ciclo. Los estados estimados del filtro de Kalman extendido y del observador de alta ganancia pueden incluso diverger si no son suficientemente cercanos, lo cual implica localidad de la propiedad de observabilidad (esto no se muestra en las gráficas).

En el caso del EKF, la estimación de la concentración de sustrato resulta relativamente rápida, aunque al inicio invariablemente diverge, aún estando los estados estimados iniciales cercanos a los reales. En cambio, la estimación de la concentración de microorganismos generalmente es mala, aunque al final del ciclo converge.

Para el observador de alta ganancia sucede lo contrario: la estimación de la biomasa es relativamente buena, pero la del sustrato siempre es mala y no converge sino hasta casi el final del ciclo. También se observó que el tamaño de la región de convergencia es inversamente proporcional al valor de la ganancia θ , lo cual implica un compromiso entre velocidad de convergencia y tamaño de esta región.

A diferencia de los otros observadores, los estados del observador asintótico convergen siempre a los estados reales mientras exista una entrada diferente de cero, aunque claramente, debido a su característica no exponencial, si el error de observación al inicio del ciclo es grande, al final también lo será, tal como se esperaba (véase la expresión (4.52)). Además, después de que se ha llenado el reactor y $Q_{en} = 0$, este observador diverge, ya que la dinámica del error es inestable. Por lo tanto, este observador no puede usarse para implantar la estrategia de control propuesta, ya que la concentración de sustrato estimado podría no alcanzar un valor inferior al mínimo y nunca terminar la etapa de reacción. En cambio, en los otros dos observadores, aunque los estados estimados estén alejados de los reales durante gran parte del ciclo, al final convergen.

En la figura 5.7 se muestra el resultado de aplicar una entrada mala como la de la expresión (4.13) con las condiciones iniciales $\mathbf{x}_0 = [20, 6300, 6]^T$ y $\hat{\mathbf{x}}_0 = [31, 6300, 6]^T$; es decir:

$$Q_{\text{en}}(t) = \begin{cases} 0, & \text{si } V(t) = V_f \leq V_{\text{max}} \\ \frac{\mu(S)V(t)X(t)}{Y \left[S_{\text{en}} - 2 \left(\frac{S_1(t)S_2(t)}{S_1(t) + S_2(t)} \right) \right]} & \text{si } V(t) < V_f. \end{cases}$$

Se observa que el error de observación cuando la entrada es mala es el mismo para los tres observadores debido a la indistinguibilidad de los estados. Esto es consecuencia de que el error entre la salida real y estimada es cero a pesar de que $\hat{S}(t)$ y $S(t)$ sean diferentes. Cuando el estado es nuevamente observable, el error converge rápidamente a cero para el EKF y el observador de alta ganancia, mientras que diverge para el asintótico, tal como se esperaba.

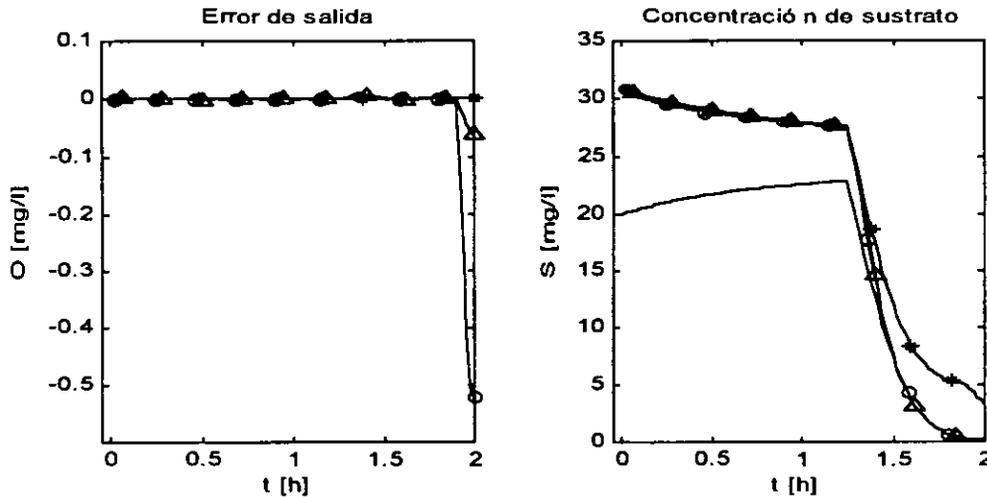


Figura 5.7: Estimación de S y X al aplicar una entrada mala: EKF (Δ), Alta ganancia (\circ), Observador asintótico ($*$); valor real ($—$).

5.3.2 Observadores en lazo cerrado

Para probar si efectivamente los dos observadores seleccionados podrían funcionar con la estrategia de control propuesta, se hicieron simulaciones empleando los estados estimados \hat{X} y \hat{S} para operar el controlador. En las figuras 5.8 y 5.9 se muestran los resultados obtenidos para tres ciclos empleando el EKF y el observador de alta ganancia, respectivamente. Las condiciones

iniciales son las mismas, tanto de la planta real, como de ambos observadores. Para la planta son aquellas dadas por (5.1), mientras que para los observadores fueron:

$$X_0 = 6400 \text{ [mg/l]} \quad S_0 = 1.5 \text{ [mg/l]} \quad O_0 = 6.5 \text{ [mg/l]}. \quad (5.2)$$

Además se adicionó ruido blanco a la medición de la salida (oxígeno disuelto), para estudiar la robustez de la estrategia ante esta situación.

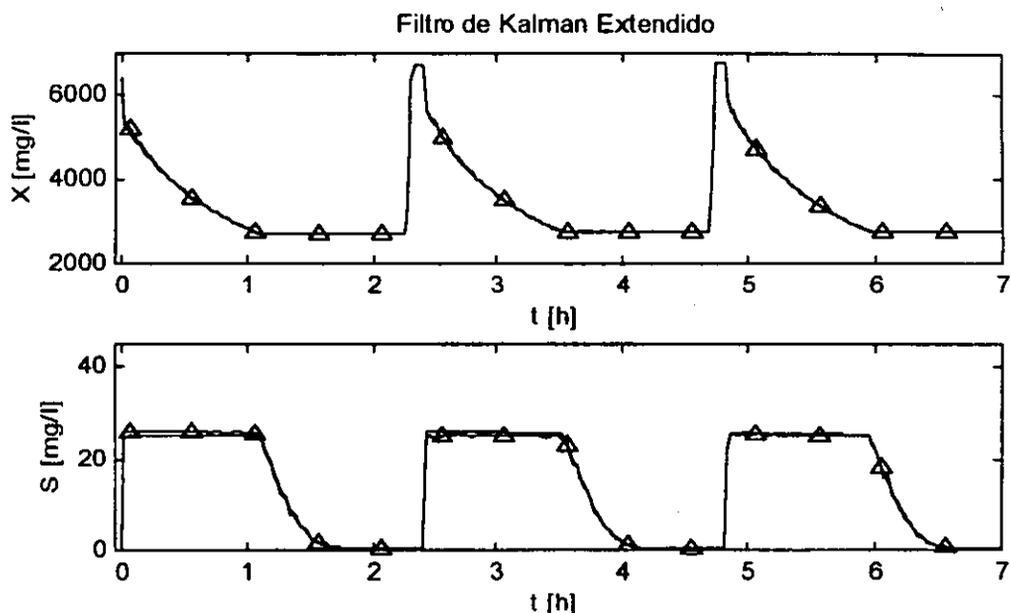


Figura 5.8: Concentraciones de biomasa X y sustrato S (—) y su estimación (Δ) usando el EKF en lazo cerrado.

Se observa que el filtro de Kalman extendido en este caso resulta más adecuado como observador. El error de observación converge rápidamente a cero en todos los casos y el ruido en la medición parece ser efectivamente filtrado. En cambio, el observador de alta ganancia puede en algunos casos diverger, la estimación no es suficientemente rápida y es muy sensible al ruido. La estimación mejora en cada ciclo porque el error inicial es cada vez menor. En ambos observadores el error de observación converge rápidamente a cero cuando $Q_{en}(t) = 0$, ya que tanto S como \hat{S} tienden a cero naturalmente. Por ello, el tiempo de reacción sí resulta menor que cuando se opera el reactor como SBR; compárense las 2.128 [h] de ésta última con las 1.781 [h] que resulta al usar la estrategia propuesta.

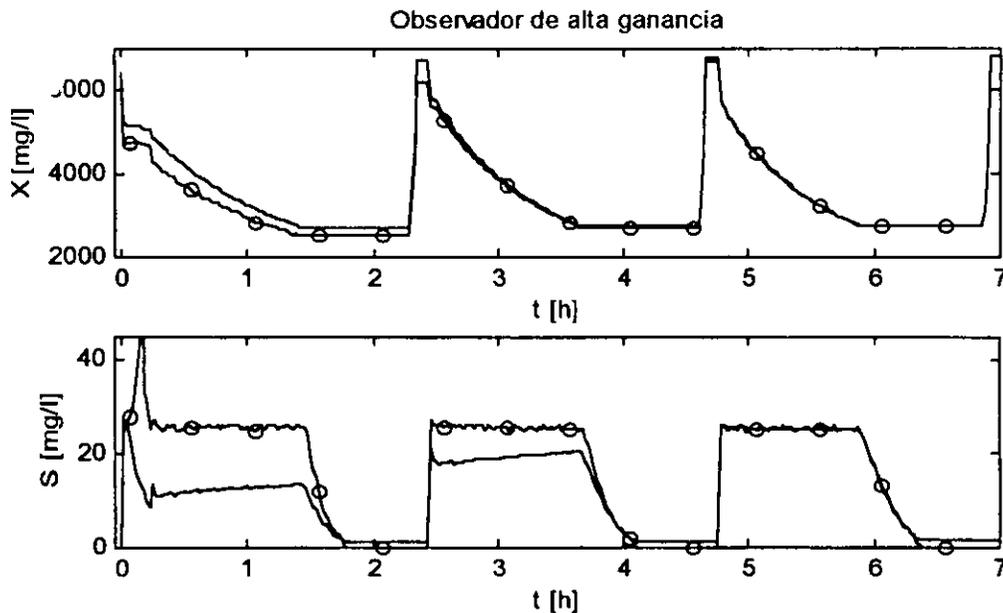


Figura 5.9: Concentraciones de biomasa X y sustrato S (—) y su estimación (o) usando el observador de alta ganancia en lazo cerrado.

También se observa (en menor grado con el EKF) que el controlador mantiene a la concentración de sustrato *estimada* en el valor óptimo S^* , y no a la “real”, lo cual le resta optimalidad a la estrategia. Obsérvese, por ejemplo, que al usar el observador de alta ganancia en este caso, el controlador termina la reacción antes de que el valor de sustrato “real” sea menor que el mínimo requerido.

5.3.3 Robustez paramétrica de la estrategia

En la práctica es difícil determinar los parámetros reales de la planta. En primer lugar, no hay que perder de vista que el modelo con el que se trabaja es una aproximación y simplificación de lo que sucede en la realidad. En segundo lugar, estos parámetros no son constantes; el consorcio de microorganismos no se comporta siempre igual, existen variaciones en el flujo másico de entrada de oxígeno, la mortalidad de microorganismos es influida por factores externos, etc. Por ello, vale la pena evaluar qué tan robusta resulta esta estrategia de control ante variaciones o diferencias entre los parámetros reales y los usados por el estimador. En la figura 5.10 se muestra, para un

ciclo, el resultado de no usar los parámetros nominales en el observador con éste en lazo abierto. Los parámetros empleados se muestran en la tabla 5.4.

Aunque el observador de alta ganancia aparenta ser el más robusto ante variación paramétrica, también es el menos robusto ante ruido en la medición. El observador asintótico es el menos robusto ante incertidumbre paramétrica; aunque su estructura es independiente del valor real de $\mu(S)X$, es muy sensible a variaciones en los demás parámetros. El filtro de Kalman extendido tampoco es muy robusto, pero la estimación de los estados es suficientemente buena como para ser usado en el lazo de control. Tomando en cuenta que además es robusto ante ruido en la medición, se seleccionó para ser implantado experimentalmente.

Tabla 5.4: Parámetros del observador diferentes a los de la planta

$\hat{\mu}_0 = 0.022$ [1/h]	$\hat{K}_S = 15$ [mg/l]	$\hat{K}_I = 35$ [mg/l]
$\hat{K}_{Ia} = 20$ [1/h]	$\hat{b} = 0.0045$ [1/h]	$\hat{K}_d = 0$ [1/h]
$\hat{Y} = 0.33$	$\hat{Y}_{X0} = 0.78$	$\hat{O}_{sat} = 7.1$ [mg/l]

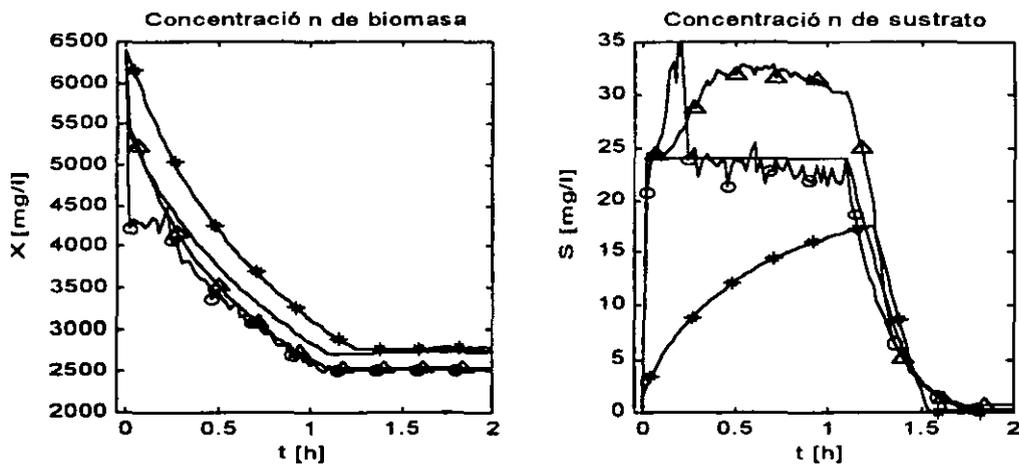


Figura 5.10: Estimación de S y X con parámetros diferentes a los nominales: EKF (Δ), Alta ganancia (\circ), Observador asintótico ($*$); valor real (—).

5.4 Implantación experimental

Se ha supuesto que el volumen de agua en el biorreactor es medible. Aunque esto es posible en la práctica con sensores relativamente económicos y confiables, en este trabajo no se empleó un medidor de volumen. En cambio, dado que se tenía acceso al conocimiento de los flujos de entrada y salida y se conocía el volumen inicial, se empleó un integrador numérico para estimarlo:

$$V(t) = V_0 + \int_0^t (Q_{\text{en}}(\tau) - Q_{\text{sal}}(\tau)) d\tau. \quad (5.3)$$

Este estimador no es ni robusto ante ruido en la medición, ni converge al volumen real, pero si las mediciones de los flujos de entrada y salida son suficientemente buenas y se conoce con suficiente exactitud el volumen inicial, puede resultar adecuado en este proceso.

El controlador de tiempo óptimo, junto con el filtro de Kalman extendido, se implantaron en una computadora personal acondicionada con una tarjeta de adquisición de datos dSPACE. Tanto el controlador como el observador se diseñaron usando SIMULINK y MATLAB. La plantilla resultante posteriormente fue complida en C y usada por los programas COCKPIT y TRACE, los cuales se emplearon como interfaz con el usuario y visualizador de datos, respectivamente.

Se emplearon dos bombas peristálticas para llenar y vaciar el reactor, las cuales podían ser controladas y leídas desde la computadora. La concentración de oxígeno disuelto se midió en línea con un oxímetro digital permanentemente sumergido en el agua del reactor. Una válvula solenoide permitía controlar el flujo de aire y además se contaba con un agitador controlado por una tarjeta hecha para este propósito.

5.4.1 Desempeño de la estrategia de control

Para poder comparar el desempeño de la estrategia propuesta con una estrategia usual tipo SBR, el reactor se puso a funcionar alternando estas dos estrategias cada ciclo. De esta manera, los parámetros del reactor bajo cualquiera de las dos estrategias serían similares. Si no se operara así, los microorganismos se aclimatarían a cada estrategia y los parámetros serían diferentes. La fase de reacción además se implantó de tal manera que no terminara sino hasta pasado un tiempo después de detectada la concentración

de sustrato mínima; esto se hizo para tener un margen de seguridad en el caso de que se detectara prematuramente.

Los parámetros de la planta empleados son los mostrados en la tabla 5.1 y los del observador son los de la tabla 5.3. En la figura 5.11 izquierda se muestran los datos obtenidos para la concentración de sustrato en un ciclo representativo usando la estrategia SBR. Para el siguiente ciclo (usando la estrategia de control óptimo con EKF) se muestran los resultados de la estimación y los valores reales en la figura 5.11 derecha. Los datos reales se obtuvieron mediante pruebas de laboratorio.

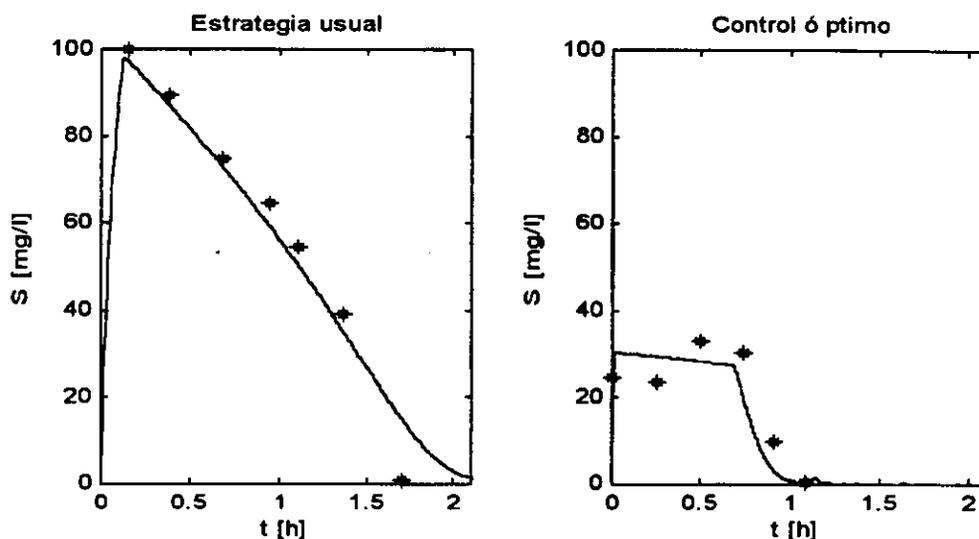


Figura 5.11: Concentraciones de sustrato real (*) y estimada (—) en tiempo real: comparación de la estrategia usual tipo SBR y la de tiempo óptimo con observador

Se observa que la estimación es relativamente buena y que la concentración de sustrato real se mantiene alrededor de la concentración $S^* = 24.9 \text{ [mg/l]}$ mientras se llena el reactor. Posteriormente la concentración real baja casi a cero, aunque su estimado todavía tarda aproximadamente 0.2 [h] más en lograrlo y terminar la fase de reacción. Esto es benéfico en el sentido de que la reacción termina cuando efectivamente se ha degradado todo el sustrato. El tiempo de llenado y reacción para este ciclo fue de 1.25 [h] , el cual es menor a las aproximadamente 1.75 [h] que duró en el ciclo anterior bajo un esquema de tipo SBR. La disminución fue del 28.75% , mayor que lo obtenido en simulaciones (16.64%). Normalmente se esperaría

que fuera menor, pero no se debe olvidar que el modelo con el que se trabaja es una burda aproximación de la compleja realidad y que no toma en cuenta otro tipo de fenómenos bioquímicos presentes durante la reacción.

5.4.2 **Formación de metabolito**

Un fenómeno que se observó al automatizar equívocamente la operación del reactor fue la producción de un metabolito como un subproducto de la degradación del 4-clorofenol. Cuando los parámetros del modelo matemático usado en el observador y el controlador no correspondían con aquellos que describen adecuadamente el comportamiento dinámico real de la planta, en algunas ocasiones el flujo de entrada demandado por el controlador resultaba demasiado pequeño. En estos casos la concentración de sustrato se mantuvo baja durante casi toda la reacción. Sin embargo, esto no implicó que, al terminar de llenarse el biorreactor, casi todo el sustrato del influente hubiera sido transformado a materia celular y desechos inocuos.

En el caso específico del 4-clorofenol, la degradación puede seguir dos rutas metabólicas distintas. Por un lado se puede transformar directamente en materia celular (más microorganismos), pero por otro lado, puede transformarse en un metabolito que posteriormente es degradado en materia celular. Cuando la concentración de sustrato se mantuvo baja durante casi toda la reacción, la degradación aparentemente siguió la segunda ruta metabólica. Esto se observó mediante un cambio en la coloración del agua dentro del reactor: al tomar muestras y filtrar los lodos, el color observado era un amarillo verdoso, lo cual fue comprobado posteriormente mediante espectrografía.

En la figura 5.12 se muestran los resultados obtenidos para un ciclo en el que se observó este fenómeno. Obsérvese que una vez que se forma el metabolito, tarda mucho en eliminarse por completo (existe una relación directa entre la absorbancia a 380 [nm] y su concentración), lo cual no es deseable y debe evitarse a toda costa. El experimento mostrado en la figura fue monitoreado durante toda la reacción. Nótese como, en cuanto se observó el cambio de coloración —aproximadamente a los 20 minutos—, se intentaron cambiar los parámetros del observador para evitar este fenómeno y llenar más rápidamente, pero no fue suficiente y se requirió esperar 3 horas más para poder iniciar la decantación.

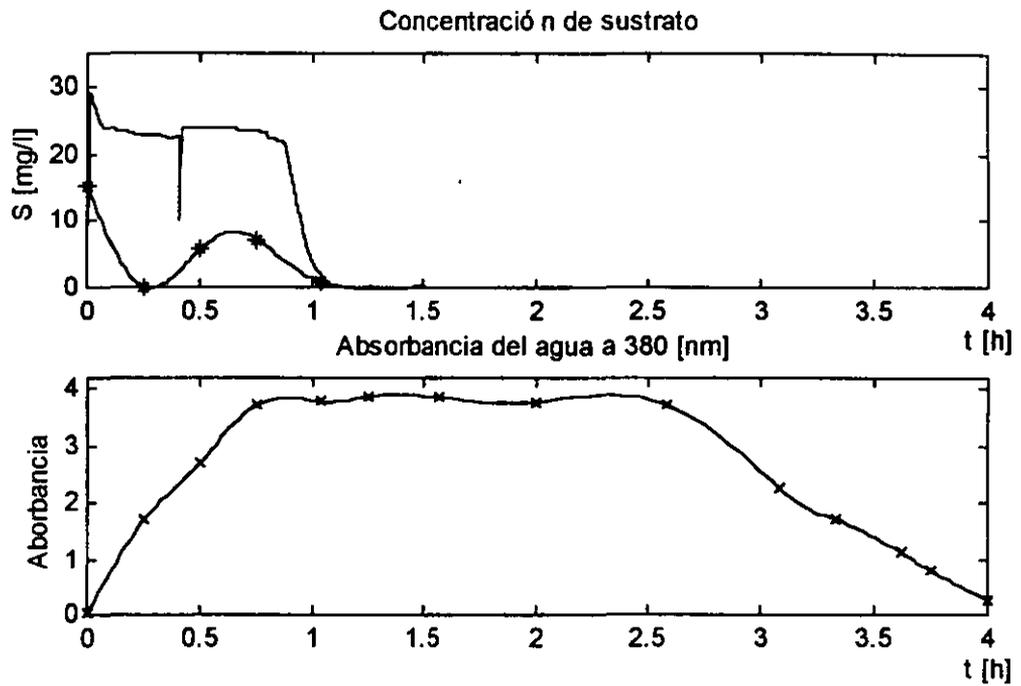


Figura 5.12: Concentraciones de sustrato real (*) y estimada (—) (arriba), y absorbancia del agua a 380 [nm] cuando la estrategia óptima llena muy lentamente (abajo).

5.4.3 Operación continua

Para probar la operación de la estrategia de control óptimo con observador en forma continua, se implantó esta estrategia en el mismo biorreactor. Se intercambiaron también 4 litros de agua y se ajustaron manualmente los parámetros del observador según se observara su desempeño en la degradación de sustrato, cuidando no provocar el fenómeno descrito anteriormente. Para evaluar la operación continua, cada día, durante las fases de llenado y reacción de algún ciclo, se tomaron muestras del agua en el biorreactor y se analizaron en laboratorio para obtener las concentraciones reales de sustrato y biomasa. En la figura 5.13 se muestran, para la concentración de sustrato, cuatro ciclos representativos diferentes, correspondientes a días distintos².

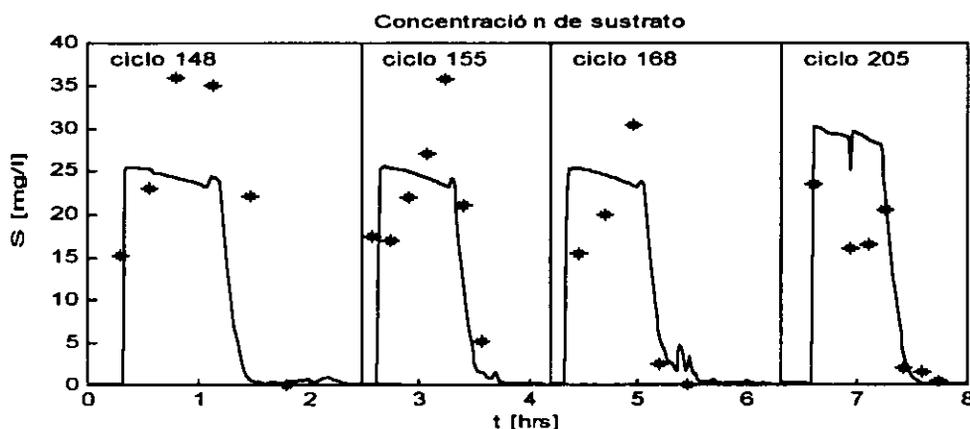


Figura 5.13: Concentraciones de sustrato real (*) y estimada (—) usando la estrategia propuesta en forma continua.

Aunque la concentración de sustrato estimada no siempre corresponde a la real, se observa que en todos los casos la concentración al final de la reacción siempre fue menor que la mínima requerida y los tiempos de reacción son menores que los obtenidos usando la estrategia usual. Evidentemente este último resultado no es estrictamente comparable, pues intervienen otros fenómenos que no se toman en cuenta en este estudio, tales como la aclimatación [5]. Sin embargo, muestran que efectivamente es posible automatizar eficientemente un biorreactor aerobio secuencial discontinuo usado en el tratamiento de aguas residuales con compuestos xenobióticos.

²La escala de tiempo sólo se muestra como referencia; los valores no corresponden a la realidad.

Capítulo 6

Conclusiones

Este trabajo presenta resultados alentadores en cuanto a la automatización y eficientización de procesos de tratamiento de aguas residuales. Por un lado se valida un modelo matemático relativamente simple y se comprueba que efectivamente un controlador de tiempo óptimo puede reducir el tiempo de reacción. Por otro lado, se hace un análisis de observabilidad del sistema y se intenta diseñar un observador de estados para el proceso.

El modelo matemático empleado es sencillo y no involucra demasiados estados. Agrupar el complejo comportamiento de un consorcio de microorganismos en una sola variable permite trabajar con un modelo matemático que, aunque no refleja fielmente la dinámica real del proceso, sí es suficientemente bueno como para diseñar un controlador para el proceso y buscarle propiedades de observabilidad. Éstas a su vez fueron comprobadas en simulación.

El controlador de tiempo óptimo reduce el tiempo de reacción, lo cual permite tratar mayores volúmenes de agua residual en un mismo día sin modificar las dimensiones del reactor, o bien, disminuir estas últimas para tratar la misma cantidad de agua. Para el biorreactor estudiado en este trabajo, en simulación la disminución fue del 16.64%, mientras que al implantarse en tiempo real fue del 28.75%.

El modelo del biorreactor es observable, pero no completa ni uniformemente. Ninguno de los métodos de diseño de observadores revisados permite diseñar un observador global para este sistema en particular. A pesar de ello, se diseñaron tres observadores y se vio que sólo dos de ellos podrían ser usados en el lazo de control. De estos dos, se seleccionó el filtro de Kalman extendido para ser implantado junto con la estrategia de control de tiempo

óptimo en tiempo real, en un biorreactor piloto de laboratorio.

Cuando los parámetros del sistema son conocidos, la estrategia de control óptimo con observador resulta adecuada para automatizar el proceso. Los resultados obtenidos al respecto son alentadores en el sentido de que, aunque aún no se logra una estimación totalmente confiable de los estados no medibles, ésta es suficiente para lograr un adecuado control del proceso que efectivamente reduce el tiempo de reacción. Se observaron además otros fenómenos no considerados en el modelo matemático, que por lo pronto deben evitarse para que la estrategia funcione adecuadamente.

Lo presentado en este trabajo aún dista mucho de estar completo y ser definitivo. Por lo pronto, hacen falta hacer más pruebas experimentales y en trabajos futuros tratar de realizar lo siguiente:

1. Verificar experimentalmente si con mayores concentraciones de sustrato en el influente existe una mayor disminución del tiempo de reacción;
2. Investigar el efecto de no considerar que la concentración de sustrato en el influente es constante y evaluar cómo afectan los choques de concentración el desempeño del reactor;
3. Analizar el sistema planta-controlador-observador y demostrar propiedades;
4. Hacer más robusta la estrategia de control de tiempo óptimo ante incertidumbre paramétrica;
5. Proponer alguna otra estrategia para compensar la incertidumbre paramétrica en el observador; por ejemplo, con el diseño de un identificador de parámetros o un observador adaptable;
6. Ampliar el modelo matemático para que refleje otros fenómenos aún no considerados, tales como la producción de metabolito con bajas concentraciones de sustrato o la aclimatación y desaclimatación de los microorganismos;
7. Dado que ninguno de los observadores revisados permite diseñar uno global para el sistema estudiado, proponer otra estrategia de diseño de observadores para sistemas observables, pero no completa ni uniformemente observables.

Bibliografía

- [1] D. Aeyels. Generic observability of differentiable systems. *SIAM J. Control and Optimization*, 19:595–603, 1981.
- [2] G. Bastin y D. Dochain. *On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactors*, volume 1 of *Process Measurement and Control*. Elsevier, Amsterdam, 1990.
- [3] W. Baumann y W. Rugh. Feedback control of analytic nonlinear systems by extended linearization. *SIAM J. Control and Optimization*, 25:1341–1352, 1987.
- [4] G. Besançon y H. Hammouri. On uniform observation of nonuniformly observable systems. *Syst. Control Lett.*, 29:9–19, 1996.
- [5] G. Buitrón. *Biodégradation de composés xénobiotiques par un procédé discontinu de type SBR*. No. d ordre 254, Institut National de Sciences Appliquées, Toulouse, Francia, 1993.
- [6] C.-T. Chen. *Linear System Theory and Design*. Holt, Rinehart and Winston, New York, N.Y., 1984.
- [7] F. Deza, B. E., J.-P. Gauthier, y D. Rakotopara. High gain estimation for nonlinear systems. *Syst. Control Lett.*, 18:295–299, 1992.
- [8] V. Fromion y G. Ferreres. An incremental framework for the extended Kalman filter. En *Proc. of the 4th European Control Conference*, Bruselas, Bélgica, 1997.
- [9] J.-P. Gauthier y G. Bornard. Observability for any $u(t)$ of a class of nonlinear systems. *IEEE Trans. Automatic Control*, AC-26(4):922–926, 1981.

- [10] J.-P. Gauthier, H. Hammouri, y S. Othman. A simple observer for nonlinear systems. Applications to bioreactors. *IEEE Trans. Automatic Control*, 37(6):875–880, 1992.
- [11] A. Gelb, editor. *Applied Optimal Estimation*. The Analytical Sciences Corporation, Reading, Massachusetts, 1974.
- [12] P. A. Ioannou y J. Sun. *Robust Adaptive Control*. Prentice–Hall, Upsaddle River, N.J., 1996.
- [13] R. L. Irvine y L. H. Ketchum, Jr. Sequencing batch reactors for biological wastewater treatment. *Critical Reviews in Environmental Control*, 18(4):255–294, 1989.
- [14] M. R. James. *Asymptotic nonlinear filtering and large deviations with application to observer design*. Order no. 8818408, University of Maryland, College Park, MD, 1988.
- [15] H. K. Khalil. *Nonlinear Systems*. Prentice–Hall, Upsaddle River, N.J., 1997.
- [16] E. Misawa y J. Hedrick. Nonlinear observers —a state-of-the-art survey. *Trans. ASME J. Dynamic Syst. Meas. Control*, 111:344–351, 1989.
- [17] P. Moraal y J. Grizzle. Observer design for nonlinear systems with discrete time measurements. *IEEE Trans. Automatic Control*, 40(3):395–404, 1995.
- [18] J. Moreno. Optimal time control of bioreactors for the wastewater treatment. *Optimal Control Applications and Methods*, sometido, 1997.
- [19] J. Moreno. Optimal time control of sequencing batch reactors for industrial wastewater treatment. En *Conference on Decision and Control (CDC)*, San Diego, California, Diciembre 1997.
- [20] J. Moreno y G. Buitrón. Optimización de la biodegradación de efluentes contaminados con compuestos tóxicos. En *XXV Congreso Interamericano de Ingeniería Sanitaria y Ambiental*, México, D.F., Noviembre 1996.
- [21] H. Nijmeijer y A. van der Schaft. *Nonlinear Dynamical Control Systems*. Springer–Verlag, New York, N.Y., 1990.

- [22] J. Schaffner y M. Zeitz. *Entwurf nichtlinearer Regelungen*, chapter Entwurf nichtlinearer Beobachter. R. Oldenburg Verlag, München, Alemania, 1995.
- [23] K. Schügerl. *Bioreaction Engineering*, volume 1. John Wiley & Sons, Chichester, N.J., 1987.
- [24] H. Spanjers, P. Vanrolleghem, G. Olsson, y P. Dold. Respirometry in control of activated sludge processes. *Wat. Sci. Tech.*, 34(3/4):117–126, 1996.
- [25] F. Thau. Observing the state of nonlinear dynamic systems. *Int. J. Control*, 17:471–479, 1973.
- [26] B. Walcott, M. Corless, y S. Žak. Comparative study of non-linear state observation techniques. *Int. J. Control*, 45(6):2106–2132, 1987.
- [27] B. Walcott y S. Žak. State observation of nonlinear uncertain dynamical systems. *IEEE Trans. Automatic Control*, AC-32(2):166–169, 1987.
- [28] M. Zeitz. Nichtlineare beobachter. *Regelungstechnik*, 27(8):241–272, 1979.