Memorias del Congreso Nacional de Control Automático
ISSN: 2594-2492

Estimación robusta de los estados de un tren de tres reactores químicos exotérmicos

Luis A. Contreras * **Hugo A. Franco-de los Reyes** *
Jesús Álvarez **

* *Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 Mexico City, Mexico (e-mail: {LContrerasA,HFrancoR}@iingen.unam.mx).*
** *Universidad Autónoma Metropolitana, 09340 Mexico City, Mexico (e-mail: jac@xanum.uam.mx).*

Abstract: Se estudia el problema de diseñar un estimador para inferir en línea cinco estados (tres concentraciones y dos temperaturas) de un tren de tres reactores químicos con reciclo a partir de mediciones de: (i) entradas exógenas de flujo volumétrico y temperatura y (ii) temperatura de uno de los reactores. El objetivo es obtener un diseño con construcción y sintonización sistemática con un compromiso adecuado entre velocidad de convergencia, robustez y carga computacional en línea. Mediante un enfoque constructivo se obtiene: (i) un criterio de convergencia robusta, (ii) sintonización simple, (ii) criterio para ubicar el sensor, y (iii) con mucho menos ecuaciones, funcionamiento similar al del filtro extendido de Kalman (FEK).

Keywords: estimación robusta, estimador geométrico, filtro extendido de Klaman, tren de reactores químicos, control de procesos

1. INTRODUCCIÓN

Los reactores químicos tienen un papel muy importante ya que son empleados para producir un gran número de sustancias y materias primas destinadas a la industria. Estos productos son sintetizados en reactores tubulares, así como en trenes de reactores continuos los cuales son controlados mediante sistemas de enfriamiento (extracción de calor) [Froment et al., 1990]. Los reactores tubulares son modelados mediante ecuaciones diferenciales parciales (EDPs), mientras que los trenes de reactores mediante ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs), aunque, de acuerdo al enfoque de modelado por etapas [Deans and Lapidus, 1960], es posible modelar los reactores tubulares como una interconexión de N reactores de tanque descritos con un modelo de ODEs por etapas de bajo orden. Debido a la reacción química exotérmica que ocurre en estos reactores, mediante la cual se obtiene un producto final a partir de un material reactante que ingresa continuamente al tanque, estos sistemas tienen un comportamiento altamente no lineal que incluye multiplicidad de estados estacionarios, fenómenos de bifurcación, sensibilidad paramétrica, entre otros [Aris and Amundson, 1958, Uppal et al., 1974, Varma, 1980] y es por esto que un correcto funcionamiento en lazo cerrado (con la interacción de un controlador) es frecuentemente un objeto de estudio.

Es posible que, para la implementación de un esquema de control, sea necesario conocer todos los estados del reactor o del tren de reactores, lo cual puede ser una tarea complicada debido a que es difícil contar con mediciones para cada uno de los estados, por lo que se tiene que recurrir a un algoritmo de observación o estimación que infiera el valor en todo tiempo de los estados del sistema o, simplemente, sea empleado como un mecanismo de monitoreo.

Se han presentado diversos estudios e investigaciones en torno al problema de estimación [Baratti et al., 1995, Joseph and Brosilow, 1978, Oisiovici and Cruz, 2000] y es suficiente mencionar que el algoritmo de estimación más usado y aceptado (en la industria) es el Filtro Extendido de Kalman (FEK) ya que se ha implementado satisfactoriamente en un amplio rango de aplicaciones reales. En general, un FEK bien sintonizado e implementado presenta un funcionamiento robusto en sistemas por etapas y reactores tubulares con hasta 4 componentes [Venkateswarlu and Kumar, 2006], sin embargo, el FEK tiene algunas desventajas ya que depende fuertemente del modelo, requiere la sintonización de un par de parámetros ajustables y la solución en linea de un conjunto de ecuaciones diferenciales de Riccati, el cual aumenta con la dimensión de los estados del sistema [Gelb, 1974], lo cual lo vuelve un algoritmo poco práctico para sistemas de gran dimensión. Estas desventajas han motivado la consideración del uso de algoritmos alternativos de estimación como el observador Luenberger (OL) y el estimador geométrico (EG). La ventaja de estos últimos reside en la simplicidad de implementación ya que, al no tener un conjunto de ecuaciones de Riccati que resolver, la demanda computacional necesaria es mínima en comparación con el FEK. El EG tiene la desventaja de requerir derivadas de Lie para su implementación cuyo cálculo puede volverse difícil y engorroso para modelos de alto orden, lo cual incluye una clase importante de aplicaciones entre los que se encuentran sistemas por etapas y distribuidos.

Este trabajo es un paso inductivo hacia el estudio de la detectabilidad y la estimación para reactores tubulares descritos por derivadas diferenciales parciales que son discretizados mediante el método de diferencias finitas, para los cuales, el caso de estudio (3 reactores) es el caso limite

 Copyright©AMCA. Todos los Derechos Reservados www.amca.mx

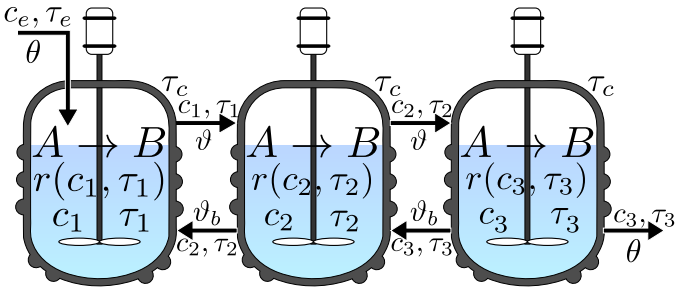

Fig. 1. Tren de tres reactores químicos exotérmicos con retroflujo

que retiene las características y propiedades de uno de mayor orden (15-30 nodos) [Franco, 2016, Nájera, 2012]. En este trabajo se diseñará un estimador a partir de mediciones de flujo volumétrico, temperatura y concentración de entrada y la temperatura de alguno de los reactores, tal que: (i) cuente con un criterio de convergencia práctica junto con una sintonización simple y transparente basada en parámetros dinámicos del sistema, haciendo uso de un rediseño del EG el cual elimina la limitante de aplicabilidad de las derivadas de Lie y haciendo una selección adecuada de la ubicación del sensor mediante una sintonización de funcionamiento con respecto la ubicación del sensor, (ii) tenga una conexión y comparación con el FEK y (iii) se pruebe con simulaciones bajo condiciones reales (ruido en el sensor).

2. PROBLEMA DE ESTIMACIÓN

2.1 Tren de tres reactores exotérmicos continuos

Se considerará el caso de estudio de un tren de tres reactores químicos exotérmicos con retroflujo (Fig. 1) dentro del cual existe una reacción química exotérmica de primer orden con dependencia de temperatura tipo Arrhenius. Es común encontrar este tipo de sistemas en la industria, en procesos que emplean desde tres reactores (cómo en la síntesis del poliestireno), hasta dieciocho reactores (síntesis del butadieno). La dinámica de este tren de reactores, en su forma adimensional está dada por:

$$\dot{c}_1 = \theta c_e - \lambda_c(\tau_1)c_1 + \vartheta_b c_2, \qquad c_1(0) = c_{1o} \quad (1a)$$
$$\dot{\tau}_1 = \theta \tau_e - \lambda_\tau \tau_1 + c_1 \alpha(\tau_1) + \vartheta_b \tau_2 + \upsilon \tau_c, \qquad \tau_1(0) = \tau_{1o} \quad (1b)$$
$$\dot{c}_2 = \vartheta c_1 - [\lambda_c(\tau_2) + \vartheta_b]\, c_2 + \vartheta_b c_3, \qquad c_2(0) = c_{2o} \quad (1c)$$
$$\dot{\tau}_2 = \vartheta \tau_1 - (\lambda_\tau + \vartheta_b)\tau_2 + c_2 \alpha(\tau_2) + \vartheta_b \tau_3 + \upsilon \tau_c, \qquad \tau_2(0) = \tau_{2o} \quad (1d)$$
$$\dot{c}_3 = \vartheta c_2 - \lambda_c(\tau_3)c_3, \qquad c_3(0) = c_{3o} \quad (1e)$$
$$\dot{\tau}_3 = \vartheta \tau_2 - \lambda_\tau \tau_3 + c_3 \alpha(\tau_3) + \upsilon \tau_c, \qquad \tau_3(0) = \tau_{3o} \quad (1f)$$
$$y = \tau_m, m \in \{1, 2, 3\} := M \quad (1g)$$

donde

$$\vartheta = (1 + \varrho)\theta, \quad \vartheta_b = \varrho\theta, \quad \lambda_\tau = \vartheta + \upsilon$$
$$\lambda_c(\tau_i) = \vartheta + \alpha(\tau_i), \quad \alpha(\tau) = \mathrm{e}^{a_r - \varepsilon/\tau}$$

c_i (o τ_i) es la i-ésima concentración del reactante (o temperatura), c_e (or τ_e) es la concentración (o temperatura) a la entrada no medida (o medida), τ_c es la temperatura ajustable del sistema de enfriamiento, θ es el índice de flujo volumétrico adimensional, ϱ es la fracción del reflujo, υ es el número de transferencia de calor de Stanton, a_r es el número de la frecuencia Damköhler, y ε es la energía de activación. Para este trabajo, la salida $y = \tau_m$ será seleccionada más adelante de acuerdo a un criterio de sintonización del funcionamiento del estimador haciendo una variación en la ubicación del sensor (en que reactor se realiza la medición).

En forma vectorial la dinámica del tren de tres reactores está dada por

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{b}u,\ \boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_o, \quad (2a)$$
$$y = \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}), \quad (2b)$$

donde

$$\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}_1^T, \boldsymbol{x}_2^T, \boldsymbol{x}_3^T)^T, \quad \boldsymbol{x}_i = (c_i, \tau_i)^T, \quad i = 1, 2, 3$$
$$\boldsymbol{f} = (\boldsymbol{f}_1^T, \boldsymbol{f}_2^T, \boldsymbol{f}_3^T)^T, \quad \boldsymbol{f}_i = (f_i^c, f_i^\tau)^T,$$

$\boldsymbol{b} = (0, 1, 0, 1, 0, 1)^T$, $u = \tau_c$. Y se desea estimar el vector de estados $\boldsymbol{x}$ a partir de la medición de: flujo volumétrico θ, concentración de entrada c_e, temperatura de entrada τ_e y la temperatura de uno de los reactores (a definir) $y = \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) = \tau_m$. Para esto, se construirá un estimador, el cual debe tener un compromiso de funcionamiento entre velocidad de convergencia, robustez y simplicidad de diseño e implementación (carga/demanda computacional). Teniendo como grados de libertad: (i) ubicación del sensor, (ii) índice de estimación y (iii) la ganancia del estimador. En este caso, se construirán el algoritmo de estimación llamado Estimador Geométrico (EG) y se hará la comparación de su funcionamiento contra el Filtro Extendido de Kalman (FEK) que es el más conocido y empleado en la industria.
Para este caso, en particular, se usaron los siguientes valores de parámetros nominales

$$\theta = 3,\ \rho = 0.6,\ c_e = \upsilon = 1,\ \tau_e = 2,\ a_r = 23.719,\ \varepsilon = 50 \quad (4)$$

2.2 Planteamiento del problema

Nuestro problema consiste en estimar en linea el vector de estados $\boldsymbol{x}$ con base en mediciones de flujo, temperatura y concentración de entrada, además de la temperatura de uno de los reactores.
El estimador tiene como grado de libertad: (i) ubicación del sensor, la cual será determinada mediante una sintonización de ubicación del sensor contra funcionamiento del estimador, (ii) índice de estimación y (iii) la ganancia del estimador. Además, el algoritmo resultante será comparado con un Filtro Extendido de Kalman debido a que es el más usado.

3. ESTIMADOR GEOMÉTRICO

El problema de estimación consiste en inferir los estados del sistema de manera en linea a partir de una copia del modelo del sistema, así como de las mediciones de la salida. En el caso del estimador geométrico [Alvarez, 2000, López and Alvarez, 2004], se cuenta con una estructura de estimación definida como

$$\sigma = (\kappa, x_\varepsilon - x_\nu) :\ \kappa = (\kappa_1, \ldots, \kappa_m)',\ \kappa_i > 1 \quad (5)$$

donde κ es el vector de índices de estimación (que es un grado de libertad estructural), κ_ε es el índice de estimación (general), κ_i es el índice de estimación con respecto a la i-ésima salida y dado que, en este caso, únicamente se cuenta con un sensor, $\kappa = k_1$, x_ϵ son los estados innovados, x_ν son los estados no innovados y $x_\varepsilon - x_\nu = x$ es la partición de estados. Además se tiene el grado de libertad estructural de poder seleccionar la ubicación del sensor, es decir, en

Copyright©AMCA. Todos los Derechos Reservados www.amca.mx

que reactor realizar la medición.
Se tiene el estimador geométrico original (EGO)

$$\begin{aligned}\dot{\hat{x}}_\varepsilon &= f_\varepsilon(\hat{x},\Delta_u\hat{v}) + \Omega^{-1}(\hat{x},\hat{v})\{\Pi_y\hat{\iota} + K_y[y-h(\hat{x})]\},\\ \dot{\hat{x}}_\nu &= f_\nu(\hat{x},\Delta_u\hat{v})\\ \dot{\hat{\iota}} &= K_\iota[y-h\hat{x}]\\ \dot{\hat{v}} &= \Gamma_u\hat{v} + K_u(u-\Delta_u\hat{v})\end{aligned} \tag{6}$$

donde $\hat{x}_\varepsilon$ son los estados estimados innovados, $\hat{x}_\nu$ son los estados estimados no innovados, $\hat{\iota}$ es un estado de acción integral, $\hat{v}$ es el estimado del vector de entradas aumentado y Ω es la matriz de estimación obtenida a partir de derivadas direccionales (derivadas de Lie). El hecho de tener derivadas de Lie hace que el cálculo sea engorroso y complicado para órdenes mayores a tres. Esta limitante aplica para una clase importante de sistemas por etapas o procesos distribuidos.
Por lo tanto, se hace un rediseño el EGO para remover esa limitante. Se tiene una aproximación de la matriz de estimación de la forma:

$$\begin{aligned}O(x,u) &= [O_1'(x,u),\ldots,O_m'(x,u)]',\\ O_i'(x,u) &= [C_i(x),\ldots,C_i(x)A_\iota^{\kappa_i-1}(x,u)]\\ C_i(x) &= \frac{\partial h_i(x)}{\partial x_\iota},\quad A_\iota(x,u) = \frac{\partial f_\iota(x,u)}{\partial x_\iota},\end{aligned} \tag{7}$$

Teniendo el EGO (6) y sustituyendo su matriz de estimación Ω por la aproximación $O(x,y)$ (7) se elimina la limitante de implementación que implican las derivadas de Lie y como resultado se tiene el estimador geométrico rediseñado que será llamado simplemente EG que tiene como grado de libertad la ubicación del sensor $m \in 1,2,3 = M$:

$$\begin{aligned}\dot{\hat{x}}_\varepsilon &= f_\varepsilon(\hat{x},u) + O^{-1}\{\Pi_y\hat{\iota} + K_y[y-h(\hat{x})]\},\\ \dot{\hat{\iota}} &= K_\iota[y-h(\hat{x})]\end{aligned} \tag{8}$$

donde

$$\begin{aligned}&\Pi_y = bd[\pi_1^y,\ldots,\pi_m^y],\ \ \pi_i^y = (0,\ldots,0,1)',\ \ dim(\pi_i^y) = \kappa_\iota\\ &K_y = bd[k_1^y,\ldots,k_m^y],\ \ k_1^y = (\omega_i,\ldots,\omega_i^{\kappa_i}),\\ &K_\iota = diag(\omega_1^{\kappa_1+1},\ldots,\omega_m^{k_m+1})'\end{aligned} \tag{9}$$

La matriz diagonal de bloques cero/uno Π_y está determinada por el vector de orden de estimación κ (5) y el par de ganancias (K_y, K_ι) está dado por el esquema de ubicación de polos

$$\begin{aligned}&(\mathscr{P},\omega_y):\ \mathscr{P} = \{p_i,\ldots,p_m\}:\ p_i = \{a_1^i,\ldots,a_{\kappa_i}^i\},\\ &\omega_y = (\omega_1,\ldots,\omega_m)\end{aligned} \tag{10}$$

de acuerdo al polinomio característico, uno por salida (en este caso sólo es uno)

$$\lambda^{k_i+1} + (a_1^i\omega)\lambda^{k_i} + \ldots(a_{\kappa_i}^i\omega_i^{\kappa_i})\lambda + (\omega_i^{\kappa_i+1});\ \text{donde } i=1 \tag{11}$$

de la dinámica del error de la salida lineal, no interactiva, asignable a los polos (LNAP) prescrita

$$[L(p,\omega)]\tilde{y} = 0;\quad \tilde{y} = \hat{y} - y;\quad \hat{y} = h(\hat{x}) \tag{12}$$

donde $\mathscr{P}$ o (ω) es la configuración de ubicación de polos (o vector de ganancias de frecuencia), p es la configuración de los polos que puede ser dado por métodos estándar (ITAE, Butterworth, etc) o adaptado a cierta necesidad, y L es el operador lineal diferencial relacionado.
El estimador geométrico rediseñado es considerablemente más simple que el original ya que, mientras el original necesita de derivadas direccionales de Lie seguido de derivadas jacobianas para la construcción de la matriz de estimación Ω, el rediseñado hace uso únicamente de un modelo jacobiano de derivación para la matriz de estimación O. Suponiendo que la medición se realiza en cada uno de los tanques: $y = \tau_m$ donde $m \in M$, en la Tabla 1 se presentan los tres conjuntos posibles de estados innovados (x_ε) y no innovados x_ν.

x_ε	x_ν
τ_1	$c_1, c_2, \tau_2, c_3, \tau_3$
τ_2	$c_1, \tau_1, c_2, c_3, \tau_3$
τ_3	$c_1, \tau_1, c_2, \tau_2, c_3$

Tabla 1. Partición de estados cambiando de ubicación el sensor

Con base en estudios previos en reactores tubulares de gasificación [Badillo-Hernández et al., 2017], se diseñará el estimador con un índice de estimación $\kappa = 1$, por lo tanto, en este trabajo se usará la siguiente estructura de estimación (5), suponiendo primero, que se mide la temperatura del primer reactor

$$\kappa = 1; \qquad x_\varepsilon = \tau_1; \qquad x_\nu = [c_1, c_2, \tau_2, c_3, \tau_3]' \tag{13}$$

por lo tanto el EG resultante queda

$$\dot{\hat{x}}_\varepsilon = f_1^{\hat{\tau}}(\hat{x},u) + O^{-1}\{\Pi_y\hat{\iota} + K_y[\tau_1 - \hat{\tau}_1]\} \tag{14}$$

$$\dot{\hat{\iota}} = K_\iota[\tau_1 - \hat{\tau}_1] \tag{15}$$

donde $O = 1$, $\Pi_y = 1$, $K_y = \omega$ y $K_\iota = \omega^2$, dónde, a su vez, ω está definida como $\omega = n_\omega\lambda_n$ lo cual significa que ω es n_ω veces más rápido que la frecuencia natural del sistema λ_n [Alvarez and Lopez, 1999] y $f_1^{\hat{\tau}}$ es el estimado de la función de la temperatura del primer reactor. Está sintonización será conectada, posteriormente, con el FEK para poder utilizar la misma metodología.
En cuanto a la convergencia, la resta del estimador al proceso da cómo resultado la siguiente dinámica del error de estimación

$$\dot{\tilde{x}}_\varepsilon = f_1(\hat{x}-x,u) + O^{-1}\{\Pi_y(\hat{\iota}-\iota) + K_y[\tau_1 - \hat{\tau}_1]\} \tag{16}$$

$$\dot{\tilde{\iota}} = K_\iota[\tau_1 - \hat{\tau}_1] \tag{17}$$

$$\dot{\tilde{x}}_\nu = f_\nu(\tilde{x},u) \tag{18}$$

la dinámica de los estados no innovados tiene que ser estable (detectabilidad), mientras que la dinámica de los estados innovados puede ser inestable o estable, incluso frágilmente estable ya que se cuenta con las ganancias (seleccionadas previamente) que asegura que esa dinámica está acotada.

3.1 Criterio de ubicación del sensor

En la sección anterior se construyó el algoritmo de estimación EG considerando que el sensor se coloca en el primer reactor. En esta sección se presentan los resultados de simulaciones del funcionamiento del estimador cambiando de ubicación el sensor y se tomará una decisión sobre en que reactor realizar la medición.
En la Fig. 2 se puede observar el funcionamiento del observador colocando el sensor en el primer reactor. Se aprecia una convergencia del estimador a la señal de la planta (ref) casi inmediata (de 0.1 a 0.5 unidades de tiempo, aproximadamente), además de no presentar sobrepaso.
En la Fig. 3 se muestra el comportamiento del estimador colocando el sensor en el segundo reactor. Se puede observar que, tanto la velocidad de convergencia como la re-

 Copyright©AMCA. Todos los Derechos Reservados www.amca.mx

spuesta transitoria empeoraron comparado al caso anterior (sensor en reactor 1).
Finamente, en la Fig 4 se presenta el comportamiento del estimador colocando el sensor en el reactor 3. En este caso se puede observar que, para todas las concentraciones, la señal del estimador no converge a los estados reales en ningún momento (diverge).
Por lo tanto, se puede concluir que para fines de estimación es posible realizar la medición, tanto en el reactor 1, como en el 2 ya que el funcionamiento resulto similar entre si ya que ambos convergen al valor real de la planta que es único. Este resultado coincide con lo conocido en la industria y teoría de reactores químicos tanto para propósitos de estimación, como de control [Alonso et al., 2004, Ichikawa and Ryan, 1979]. Además, cuando se mide en el reactor 3, parece que se manifiesta una posible observabilidad bivaluada [Moreno and Alvarez, 2013] lo cual podría ser objeto de estudio en el futuro. Para este trabajo se seleccionará el reactor 1 para realizar la medición y para la implementación de los estimadores a diseñar.

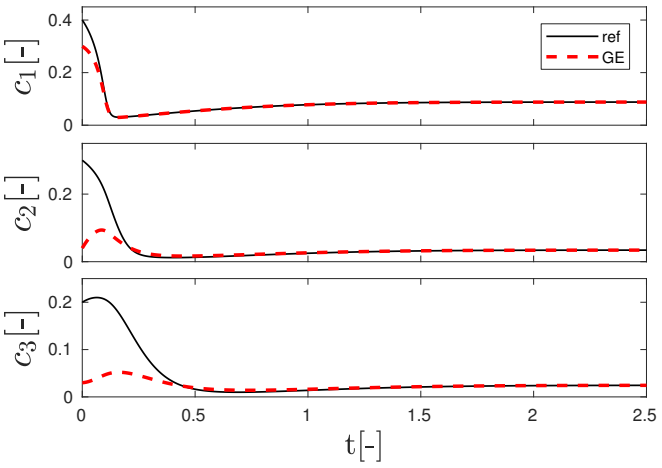

Fig. 2. Funcionamiento del Estimador Geométrico colocando el sensor en el reactor 1. Se muestran las concentraciones en los tres reactores.

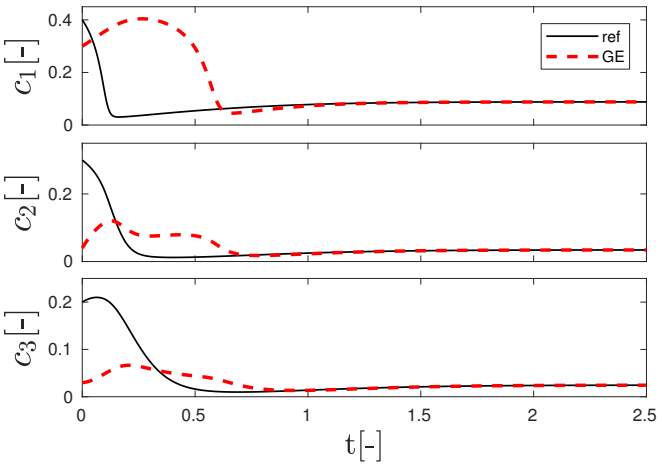

Fig. 3. Funcionamiento del Estimador Geométrico colocando el sensor en el reactor 2. Se muestran las concentraciones en los tres reactores.

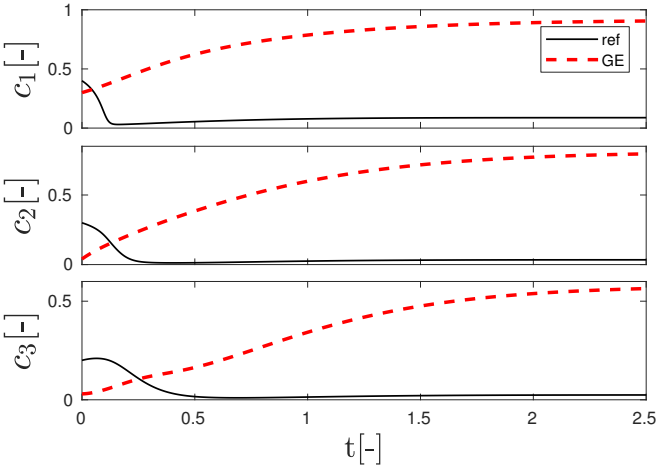

Fig. 4. Funcionamiento del Estimador Geométrico colocando el sensor en el reactor 3. Se muestran las concentraciones en los tres reactores.

4. COMPARACIÓN CON FEK

Para fines de comparación, en esta sección se hará la construcción del FEK, ya que es la técnica más usada y aceptada a nivel industrial. La implementación de este algoritmo requiere de un modelo del proceso, la selección adecuada de la salida (medición de temperatura en el reactor 1, resultado de la sección anterior) [Bian and Henson, 2006, Luyben, 2006] y la sintonización de un conjunto de parámetros ajustables. En general, un FEK bien sintonizado ofrece un desempeño robusto en sistemas por etapas y reactores tubulares [Amrehn, 1977, Oisiovici and Cruz, 2000].
El enfoque del filtro extendido de Kalman sugiere el siguiente modelo estocástico de estimación [Baratti et al., 1995, Kuruoglu et al., 1981, López and Alvarez, 2004, Oisiovici and Cruz, 2000]:

$$\dot{x} = f[x, u(t)] + B(x,t)\iota, \quad x(0) = x_0; \quad \dot{\iota} = w(t),$$
$$\iota(0) = \iota_0; \quad y = h(x) + v(t) \tag{19}$$

donde ι es el ruido blanco integrado, B es la matriz de ganancias no lineal que configura el mecanismo de inyección de ruido del modelo, w y v es el ruido Gaussiano con matrices de intensidad Q y R respectivamente. En notación compacta el modelo estocástico puede ser escrito como:

$$\dot{x}_a = f_a(x_a, t) + B_a(x_a, t)w,$$
$$x_a(0) = x_{a0} \quad y = h_a(x_a) + v \tag{20}$$

donde

$$x_a = (x', \iota')', \quad f_a(x_a, t) = \begin{bmatrix} f(x, u(t)) + B(x,t)\iota \\ 0 \end{bmatrix};$$

$$B_a = \begin{bmatrix} 0 \\ I \end{bmatrix}; \quad h_a(x_a) = h(x)$$

El correspondiente FEK está dado por

$$\dot{\hat{x}}_a = f_a(\hat{x}_a, t) + K_{FEK}[y - h_a(\hat{x}_a)], \quad \hat{x}_a(0) = \hat{x}_{a0}, \tag{21}$$
$$K_{FEK} = \Sigma H'(\hat{x}_a, t)R^{-1}$$

donde K_{FEK} es la ganancia del estimador y Σ es la solución de la ecuación diferencial de Riccati

Copyright©AMCA. Todos los Derechos Reservados www.amca.mx

$$\dot{\Sigma} = F(x_a,t)\Sigma + \Sigma F'(x_a,t) + Q - \Sigma H'(\hat{x}_a,t)R^{-1}H(\hat{x}_a,t)\Sigma, \tag{22}$$

$$\Sigma(0) = \Sigma_0$$

donde

$$F(\hat{x}_a,t) = \frac{\partial f_a(\hat{x},t)}{\partial \hat{x}_a}, \quad H(\hat{x}_a,t) = \frac{\partial h_a(\hat{x}_a)}{\partial \hat{x}_a}$$

teniendo así dos parámetros de sintonización (Q y r). En la mayoría de los casos estos parámetros son establecidos mediante prueba y error y ocasionalmente con procedimientos de optimización fuera de linea. Para lograr la conexión y la equivalencia con el EG se define lo siguiente:

$$S = \Sigma r^{-1}, \quad R = diag(r_1,\ldots,r_m) = Ir,$$
$$Q = diag(q_1,\ldots,q_m) = Iq, \quad q = \omega r$$

con lo que las ecuaciones (21) y (22) pueden ser reescritas como

$$\dot{\hat{x}}_a = f_a(\hat{x}_a,t) + g(\hat{x},S)[y - h_a(\hat{x}_a)] \tag{23}$$

$$\dot{S} = F(\hat{x}_a,t)S + SF'(\hat{x}_a,t) + \left(\frac{q}{r}\right) I - SH'(\hat{x}_a,t)H(\hat{x}_a,t)S \tag{24}$$

$$\dim x_a = \dim g(\hat{x},S) = 6; \quad \dim h_a = \dim y = 1;$$
$$\dim S = \dim F(\hat{x}_a,t) = 6\times 6; \quad \dim H = 1\times 6; \quad I = I_6$$

donde $g(\hat{x},S) = SH'(\hat{x}_a,t)$ es el vector de ganancias del FEK y (q/r) es ahora el único parámetro de sintonización (motivado del control geométrico) $\omega = (q/r)$ donde ω es el parámetro empleado para sintonizar el EG [López and Alvarez, 2004].

En nuestro caso, el vector de ganancias del Kalman tiene dimensión 6, mientras que la dimensión del conjunto de ecuaciones de Riccati a resolver en linea está dado por:

$$\frac{N(N+1)}{2} \tag{25}$$

donde N son los estados del sistema. El resultado de la fórmula anterior son los distintos elementos de la matriz $n\times n$ de Riccati $S(t)$ [Gelb, 1974]. En el caso de este trabajo ese número de ecuaciones de Riccati a resolver es de 21, lo cual implica que la implementación de este algoritmo requiere resolver un total de 27 EDOs.

En las Figs. (5) y (6) se muestra una comparación de funcionamiento entre el EG y el FEK y se observa que ambos tienen un funcionamiento muy similar en cuanto a velocidad de convergencia y respuesta transitoria. En este caso, en el que se tiene un sistema con 6 estados, la implementación del FEK requiere resolver en linea 27 EDOs, mientras que la del EG solamente 7 lo cual implica menor carga y demanda computacional. Por lo tanto se considera que el EG ofrece un mejor compromiso entre velocidad de convergencia y simplicidad. En la siguiente sección se presentan simulaciones en las cuales existe ruido en el sensor de medición, con lo cual se espera comparar la robustez de los algoritmos.

4.1 Comparación con ruido en el sensor

En esta sección se compara el funcionamiento de los estimadores diseñados pero bajo condiciones realistas, es decir, con ruido (senoidal de alta frecuencia) en el sensor de medición:

$$y = \tau_1 + 0.003sin(250t) \tag{26}$$

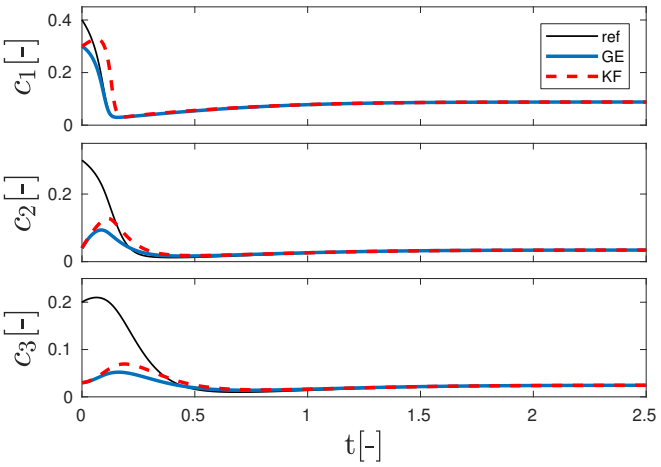

Fig. 5. Comparación de los funcionamientos del Estimador Geométrico vs Filtro Extendido de Kalman (concentraciones)

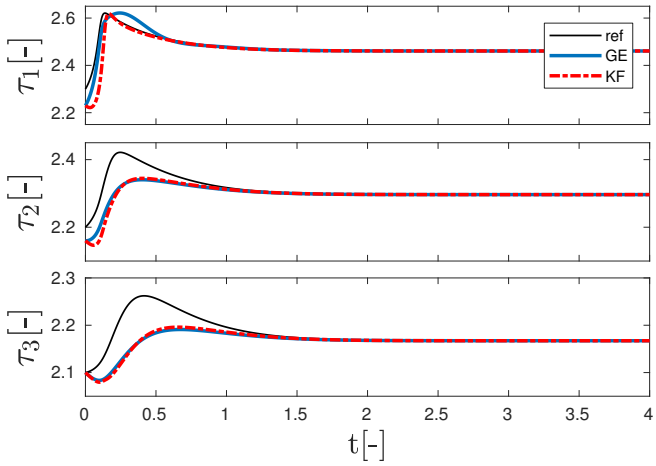

Fig. 6. Comparación delos funcionamientos del Estimador Geométrico vs Filtro Extendido de Kalman (temperaturas)

En la Fig. (7) se muestra el funcionamiento de los algoritmos y se puede observar que ambos muestran un funcionamiento muy similar en cuanto a velocidad de convergencia. Se presenta la concentración en el último reactor (reactor 3) ya que, para fines prácticos y de control, es la de interés ya que la mayoría de las veces no se puede medir y es la que se desea regular. Respecto a la robustez se puede decir que ambos atenúan adecuadamente el ruido ya que convergen a un conjunto compacto al rededor de la señal de la planta. La diferencia reside en la simplicidad de implementación y la carga computacional debido al número de EDOs que tienen que resolver en linea, siendo el EG el más simple y que también presenta una buena velocidad de convergencia al conjunto compacto.

5. CONCLUSIONES

Se diseñó un Estimador Geométrico para un tren de tres reactores químicos que cumple con el objetivo planteado: compromiso entre velocidad de convergencia, robustez y simplicidad de implementación. Se formuló un criterio de la ubicación del sensor a partir de simulaciones moviendo el sensor a lo largo de los tres reactores haciendo uso

Copyright©AMCA. Todos los Derechos Reservados www.amca.mx

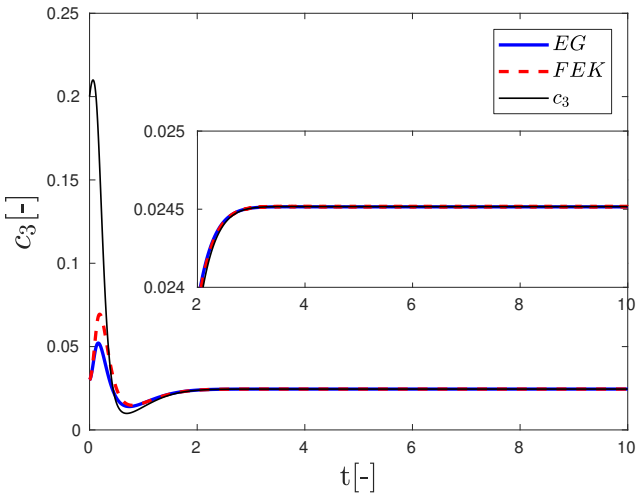

Fig. 7. Comparación del funcionamiento de EG vs FEK con ruido en el sensor

del Estimador Geométrico con grado de estimación igual a uno, resultando que medir en el primer o segundo reactor es lo más adecuado para contar con robustez y velocidad de convergencia adecuadas. Se encontró una posible observabilidad bivaluada presentada al colocar el sensor en el tercer reactor ya que se existe divergencia con respecto al valor real de los estados. Se seleccionó el primer reactor ya que coincide con lo conocido y empleado en la industria química. Se hizo una comparación con el FEK, que es el más empleado y aceptado a nivel industrial, y se mostró que, la ventaja la tiene el EG por su simplicidad de implementación gracias a las pocas EDOs que requiere solucionar teniendo que integrar casi una cuarta parte del total del FEK lo cual implica poca carga computacional. Se hicieron simulaciones en las que se considera ruido en el sensor, presentando un desempeño en el funcionamiento similar en ambos algoritmos de estimación aunque, el EG tiene la ventaja gracias a su fácil implementación y baja carga y demanda computacional. Este trabajo es un punto de partida hacia los reactores tubulares modelados en discretizaciones de un orden mayor, así cómo, la posibilidad de probar el índice de estimación $\kappa = 2$ y si puede mejorar el funcionamiento, además de estudiar más a fondo la posible observabilidad bivaluada encontrada al colocar el sensor en el tercer reactor. Además del diseño de un controlador avanzado para este sistema con conexión a un PI de nivel industrial.

REFERENCIAS

Alonso, A.A., Kevrekidis, I.G., Banga, J.R., and Frouzakis, C.E. (2004). Optimal sensor location and reduced order observer design for distributed process systems. *Computers & chemical engineering*, 28(1), 27–35.

Alvarez, J. (2000). Nonlinear state estimation with robust convergence. *Journal of Process Control*, 10(1), 59–71.

Alvarez, J. and Lopez, T. (1999). Robust dynamic state estimation of nonlinear plants. *AICHE journal*, 45(1), 107–123.

Amrehn, H. (1977). Computer control in the polymerization industry. *Automatica*, 13(5), 533–545.

Aris, R. and Amundson, N.R. (1958). An analysis of chemical reactor stability and control—i: The possibility of local control, with perfect or imperfect control mechanisms. *Chemical Engineering Science*, 7(3), 121–131.

Badillo-Hernández, U., Nájera, I., Álvarez, J., and Álvarez-Icaza, L.A. (2017). State profile estimation in a biomass gasification tubular reactor. *IFAC-PapersOnLine*, 50(1), 10208–10213.

Baratti, R., Bertucco, A., Da Rold, A., and Morbidelli, M. (1995). Development of a composition estimator for binary distillation columns. application to a pilot plant. *Chemical Engineering Science*, 50(10), 1541–1550.

Bian, S. and Henson, M.A. (2006). Measurement selection for on-line estimation of nonlinear wave models for high purity distillation columns. *Chemical Engineering Science*, 61(10), 3210–3222.

Deans, H. and Lapidus, L. (1960). A computational model for predicting and correlating the behavior of fixed-bed reactors: I. derivation of model for nonreactive systems. *AIChE Journal*, 6(4), 656–663.

Franco, H. (2016). *Contol Saturado de un Reactor Químico Tubular Exotérmico*. Master's thesis, UNAM.

Froment, G.F., Bischoff, K.B., and De Wilde, J. (1990). *Chemical reactor analysis and design*, volume 2. Wiley New York.

Gelb, A. (1974). *Applied optimal estimation*. MIT press.

Ichikawa, A. and Ryan, E.P. (1979). Sensor and controller location problems for distributed parameter systems. *Automatica*, 15(3), 347–352.

Joseph, B. and Brosilow, C.B. (1978). Inferential control of processes: Part i. steady state analysis and design. *AIChE Journal*, 24(3), 485–492.

Kuruoglu, N., Ramirez, W.F., and Clough, D.E. (1981). Distributed parameter estimation and identification for system with fast and slow dynamics: a tubular, fixed-bed catalytic reactor to form styrene. *Chemical Engineering Science*, 36(8), 1357–1364.

López, T. and Alvarez, J. (2004). On the effect of the estimation structure in the functioning of a nonlinear copolymer reactor estimator. *Journal of Process Control*, 14(1), 99–109.

Luyben, W.L. (2006). Evaluation of criteria for selecting temperature control trays in distillation columns. *Journal of Process Control*, 16(2), 115–134.

Moreno, J.A. and Alvarez, J. (2013). A bivalued observer for a class of uncertain reactors. *IFAC Proceedings Volumes*, 46(31), 261–266.

Nájera, I. (2012). *Modelado y Control de una Clase de Reactores Tubulares Exotérmicos*. Master's thesis, UAM.

Oisiovici, R.M. and Cruz, S.L. (2000). State estimation of batch distillation columns using an extended kalman filter. *Chemical Engineering Science*, 55(20), 4667–4680.

Uppal, A., Ray, W., and Poore, A. (1974). On the dynamic behavior of continuous stirred tank reactors. *Chemical Engineering Science*, 29(4), 967–985.

Varma, A. (1980). On the number and stability of steady states of a sequence of continuous-flow stirred tank reactors. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 19(3), 316–319.

Venkateswarlu, C. and Kumar, B.J. (2006). Composition estimation of multicomponent reactive batch distillation with optimal sensor configuration. *Chemical engineering science*, 61(17), 5560–5574.

 Copyright©AMCA. Todos los Derechos Reservados www.amca.mx