

Nonlinear observability analysis in the H₂ production by photofermentation

Hilario Flores-Mejía*, Mariana Rodríguez-Jara*, Ricardo Aguilar-López** y Héctor Puebla***

*Posgrado en Ingeniería de Procesos, Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Azcapotzalco Ciudad de México 02200, México (al200307048@hotmail.com, marianarodriguez0940@gmail.com).

** Departamento de Biotecnología y Bioingeniería, CINVESTAV Zacatenco, Gustavo A. Madero, Ciudad de México, México (raguilar@cinvestav.mx).

*** Departamento de Energía, Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Azcapotzalco Ciudad de México 02200, México (hpuebla@azc.uam.mx).

Abstract: The design of state observers is critical for monitoring key bioprocess variables which are commonly not available online or are expensive to measure. Before the design of observers, the observability property must be analyzed, which allows the identification of the output variables necessary to reconstruct the states of interest. Observability for nonlinear systems is a complex problem that has been addressed in the literature. However, its application in bioprocesses is scarce. In this work, two nonlinear observability analysis approaches are applied for a biohydrogen production process: (i) The range of the observability matrix with Lie derivatives, and (ii) the empirical gramian. The results identify the required measurement for observer design purposes or output control designs in the case study.

Keywords: Bioprocesses, observability, state-observers, differential geometry, empirical gramian.

1. INTRODUCCIÓN

Los procesos biotecnológicos, incluyendo las industrias de alimentos, biofarmacéuticas, tratamientos de contaminantes, y de biocombustibles, presentan retos para su operación debido a la naturaleza de tratar con seres vivos, la presencia de perturbaciones, las interacciones de múltiples sustratos y componentes de los microorganismos y la limitada información disponible. Así, el área de bioprocesos representa un área de gran interés en aplicaciones de monitoreo, diagnóstico y control (Schügerl, 2001; Komives y Parker, 2003; van Impe et al., 2013; Lou et al., 2021).

En la literatura se han propuesto diversas metodologías para el monitoreo de bioprocesos. En forma general las metodologías disponibles se pueden clasificar en métodos basados en modelo y basados en datos. Los métodos basados en modelo incluyen los estimadores u observadores de estados (Bastin & Dochain, 1990; Dochain, 2003; Lyubenova et al., 2021). Los métodos basados en datos incluyen modelos estadísticos, modelos a partir de inteligencia artificial, y análisis fractal (Dewasone et al., 2009; Mendez-Acosta et al., 2013; Biechele et al., 2015; Alexander et al., 2020).

Debido a que los métodos basados en datos conducen a modelos o mapas de caja negra entre las variables medidas y las estimadas, así como su elevado costo computacional y esfuerzo

en su derivación e implementación (preprocesamiento de datos, entrenamiento, diseño de la arquitectura, etc.), los observadores de estado se prefieren en muchas aplicaciones. En la literatura existen varios diseños de observadores con diferentes grados de complejidad que se han aplicado en bioprocesos (Ali et al., 2015; Lyubenova et al., 2021).

Previo al diseño del observador, se debe analizar la propiedad de observabilidad, la cual se ha estudiado usando diferentes aproximaciones. La más común es la que se basa en el criterio de observabilidad de Kalman con base a una aproximación lineal del modelo original en un punto de operación dado, por lo general en los puntos de equilibrio del proceso (Bastin & Dochain, 1990; Hann and Edgar, 2002). El gramiano de observabilidad y el criterio de Popov-Belevith-Hautus son resultados equivalentes a la observabilidad de Kalman para sistemas lineales (Callier y Desoer, 2012). Debido a que los bioprocesos son altamente no-lineales, tales aproximaciones de la observabilidad pueden conducir a resultados imprecisos.

El criterio de observabilidad de Kalman se puede extender a sistemas no-lineales usando una matriz que se construye con las derivadas de Lie (Hangos et al., 2006). Debido a que los cálculos de esta matriz se complican para sistemas de alto orden y con no-linealidades importantes, tales como los bioprocesos, no es común que se presente este análisis. Por otro lado, en años recientes se han propuesto nuevas formas de estudiar la observabilidad de sistemas no-lineales, tales como

los diagramas de inferencia y el gramiano empírico (Luttmann et al., 2012; Liu et al., 2013; Powel y Morgansen, 2015; Montanari y Aguirre, 2020).

En este trabajo se presenta el análisis de observabilidad usando el enfoque de gramiano empírico y para fines de comparación el criterio de rango basado en derivadas de Lie para un modelo de “referencia” de bioprocesos que ha atraído la atención de la comunidad de control de procesos, la producción biológica de hidrogeno (Nuñez et al., 2012; Perez et al., 2015; Lyubenova et al., 2021). La producción de hidrogeno (H₂) por medio de bioprocesos se puede llevar a cabo por medio de fotólisis, foto-fermentación y fermentación oscura (Manish y Banerjee, 2008). La foto-fermentación requiere un riguroso monitoreo y control para que se lleve a cabo en forma eficiente la conversión del sustrato por los microorganismos foto-sintéticos. La contribución principal de este trabajo es extender la aplicabilidad de técnicas no convencionales en bioprocesos para el análisis de observabilidad. Hasta el mejor conocimiento de los autores, tales enfoques no se han aplicado en bioprocesos para producción de biocombustibles. Los resultados muestran además, que al usar la medición de H₂, el sistema es observable y permite el uso de observadores de estado para estimar el sustrato y la biomasa del caso de estudio.

El resto de este documento se organiza como sigue. En la siguiente sección se describen los dos enfoques de observabilidad aplicados en este trabajo. En la sección 3 se describe el caso de estudio. La sección 4 presenta los resultados del análisis de observabilidad propuesto. Finalmente, se presentan las conclusiones principales de este trabajo.

2. METODOS

El análisis de observabilidad se ocupa de identificar, a partir de las propiedades de un modelo para fines de control de un proceso, si es posible reconstruir los estados del sistema $x(t)$ a partir del conocimiento de las entradas de control $u(t)$ y de las mediciones o salidas del sistema $y(t)$. Dicho análisis es un paso fundamental antes del diseño del estimador. La observabilidad para sistemas descritos por modelos no-lineales es a menudo más exigente, en particular para un alto número de estados (King et al., 2015). Debido a esta complejidad del procedimiento analítico, es deseable un enfoque simplificado pero práctico. Se describe a continuación una técnica basada en el cálculo de un gramiano empírico. Para fines de comparación se describe además el método de rango de la matriz de observabilidad basada en derivadas de Lie.

2.1 Matrices gramianas lineales de observabilidad.

Las matrices gramianas lineales (GM) se utilizan como criterios prácticos para evaluar la observabilidad a partir de una aproximación lineal del proceso a analizar (Callier y Desoer, 2012). Considere el sistema dinámico lineal variante en el tiempo,

$$\begin{aligned}\dot{x} &= A(t)x + B(t)u \\ y &= C(t)x + D(t)u\end{aligned}\quad (1)$$

se dice que es localmente observable en un intervalo de tiempo finito $t \in [t_0, t_e]$ si y solo si la GM de observabilidad,

$$G_0^{lin} = \int_{t_0}^{t_e} \Phi^T(t, t_0) C^T(t) C(t) \Phi(t, t_0) dt \quad (2)$$

es invertible. De lo contrario, se dice que el sistema no es observable. Aquí, $\Phi(t, t_0)$ representa la matriz de transición de estado. La GM dada por (2) representa una medida basada en energía para la observabilidad, ya que caracteriza la transferencia generalizada de energía,

$$E_{meas} = \int_{t_0}^{t_e} y^T(t) y(t) dt = x_0^T G_0 x_0 \quad (3)$$

desde el estado inicial x_0 hasta las salidas medidas $y(t)$ (Callier y Desoer, 2012). Por lo tanto, la GM influye directamente en los estados que contribuyen a la energía total de medición y también en los que no influyen. Los estados que no influyen son poco observables. Uno de los mayores inconvenientes de la GM es que solo está limitada a los sistemas lineales.

2.2 Matriz gramiana de observabilidad empírica.

El concepto de la GM se ha extendido a sistemas no lineales (Singh y Hann, 2006). Powel y Morgansen (2015) proponen el enfoque gramianos empíricos de observabilidad (GEO) como una herramienta para evaluar la observabilidad (local) de sistemas no lineales con control. Este concepto evita el procedimiento de linealización y se basa solo en la simulación del sistema no lineal.

Considere el sistema no lineal con acción de control descrito por,

$$\begin{aligned}\frac{dx(t)}{dt} &= f(x(t), u(t)), \quad x(t_0) = x_0 \\ y &= h(x, u)\end{aligned}\quad (4)$$

se dice que es localmente observable en un intervalo de tiempo finito $t \in [t_0, t_e]$ si y solo si la matriz del GEO siguiente es de rango completo e invertible,

$$G_0 = \sum_{l=1}^r \sum_{m=1}^s \frac{1}{rsc_m^2} \int_{t_0}^{t_e} T_l \Psi_{lm}(t) T_l^T dt \quad (5)$$

Donde,

$$\Psi_{lmj}(t) = (y_{lmi}(t) - y_N(t))^T (y_{lmj}(t) - y_N(t)) \quad (6)$$

donde $y_{lmi}(t)$ es la solución de la Ec. (4) a una condición inicial dada,

$$x_{lmi,0} = c_m T_l e_i + x_{N,0} \quad (7)$$

y una trayectoria de entrada $u_N(t) * y_N(t)$ y representa la salida nominal. $x_{N,0} = x_N(t = t_0)$ es el estado inicial de la trayectoria del estado nominal.

En términos generales, la matriz GEO de la Ec. (5) se puede interpretar como la suma de la matriz de covarianza de salida calculada para un conjunto de diferentes condiciones iniciales (Hann et al. 2002).

Para determinar el conjunto de estados perturbados en la Ec. (7), se define el conjunto T de matrices de rotación unitarias, el conjunto M de diferentes tamaños de perturbación (pesos) y el conjunto \mathcal{E} de los vectores base de la siguiente manera:

$$\mathcal{T} = \{T_1, \dots, T_r; T_l \in \mathbb{R}^{n \times n}, T_l^T T_l = I, L = 1, \dots, r\} \quad (8)$$

$$M = \{c_1, \dots, c_s; c_m \in \mathbb{R}, c_m > 0, m = 1, \dots, s\}$$

$$\mathcal{E} = \{e_1, \dots, e_n; e_i \in \mathbb{R}^n \quad i = 1, \dots, n\}$$

Con estos conjuntos se puede determinar la región en el espacio de estado alrededor del punto de interés (incluida la distancia y dirección de perturbación del estado). Se puede notar que la definición del GEO se reduce al GM en el caso de sistemas lineales.

2.3 Observabilidad por geometría diferencial

La observabilidad de Kalman se extendió para sistemas no-lineales usando conceptos de geometría diferencial (Luttmann et al., 2012). Se considera un sistema no lineal de la forma,

$$\begin{aligned} \frac{dx(t)}{dt} &= f(x(t)) + g(x(t))u(t) \\ y(t) &= hx(t) \end{aligned} \quad (9)$$

Se considera el espacio de observación (Φ) de un sistema no-lineal, el cual se define como el espacio de funciones del sistema que contiene el plano de salida h y todos sus términos de las derivadas de Lie,

$$\Phi(x(t)) = \begin{bmatrix} h \\ \mathcal{L}_f h \\ \mathcal{L}_f^2 h \\ \dots \\ \mathcal{L}_f^{N-1} h \end{bmatrix} \quad (10)$$

Una condición de observabilidad suficiente para el sistema no lineal dado por la Ec. (9), es que la matriz dada por la Ec. (10) sea de una dimensión igual a la dimensión del vector de estados N (Hangos et al., 2006). Debido al mayor esfuerzo

computacional del cálculo de las derivadas de Lie, es más común el uso de la condición de observabilidad usando la aproximación lineal simple de la observabilidad de Kalman.

3. CASO DE ESTUDIO

El proceso de fermentación es un proceso bioquímico por el cual se degrada materia orgánica compleja, generalmente en materia más simple en condiciones anaerobias. La producción de H_2 por foto-fermentación es una alternativa atractiva debido a que es más amigable con el ambiente que los procesos convencionales y se puede combinar con el uso de luz solar y compuestos orgánicos que se encuentran en materia de desecho (Hallenbeck y Benemann, 2002; Dincer y Acar, 2015). El H_2 que se produce, como el de los métodos convencionales, tiene la ventaja que en su combustión se produce en su mayoría agua y presenta un alto rendimiento energético.

Se considera un proceso continuo de foto-fermentación de H_2 en un reactor continuo de tanque agitado isotérmico. El modelo matemático se toma de la literatura (Nuñez et al., 2012; Perez et al., 2015) y toma en cuenta las siguientes consideraciones:

- La carga orgánica de entrada se considera de un solo tipo, agrupada en el sustrato, S .
- Los microorganismos se consideran de un solo tipo, *Rhodobacter capsulatus*, representada por X .
- El H_2 se produce por la acción combinada de las bacterias y la intensidad de la luz.
- La producción de H_2 se modela por una expresión tipo Luedeking-Piret, el cual considera que el producto del metabolismo se debe al crecimiento celular, y a la cantidad presente de microorganismos.
- La cinética de crecimiento de microorganismos es del tipo Monod.

El balance de masa para el sustrato es,

$$\frac{dS}{dt} = D(S_{in} - S) - \frac{1}{Y_{x/s}} \frac{\mu_{max} S}{K_s + S} X \quad (11)$$

El cual incluye la acumulación de este, la entrada-salida, y el consumo. S (g/L) representa el sustrato, S_{in} (g/L) sustrato de entrada, D (1/h) es la velocidad de dilución, $Y_{x/s}$ (gx/gs) el coeficiente de rendimiento sustrato a biomasa, μ_{max} (1/h) constante de crecimiento máximo, K_s (g/L) constante de saturación y X (g/L) los microorganismos.

El balance de masa para los microorganismos esta dado como sigue,

$$\frac{dX}{dt} = -DX + \frac{\mu_{max} S}{K_s + S} X \quad (12)$$

En este caso se considera la acumulación, la salida de la biomasa, y su crecimiento.

Finalmente, el balance de masa para el H₂ es,

$$\frac{dH_2}{dt} = -DH_2 + \frac{1}{Y_x} \phi(I) \frac{\mu_{max} S}{K_s + S} X + \delta X \quad (13)$$

El cual considera la acumulación, la salida, y la producción asociada al metabolismo de la biomasa y a la cantidad de biomasa existente. La producción es además influenciada por la intensidad luminosa. Y_{x/H_2} (gX/ mL*L) es el coeficiente rendimiento de H₂ por el consumo de biomasa, $\phi(I)$ es la intensidad luminosa y δ (mL*L/gX*h) es la constante de producción de H₂ asociada a la concentración de biomasa, X.

4. RESULTADOS NUMERICOS

Para las simulaciones numéricas base se usaron los parámetros reportados en Pérez et al., (2015): $\mu_{max}=0.4h^{-1}$, $k_s=10$ g/L, $Y_{x/s}=0.7$ g_x/g_s, $Y_{x/H_2}=1$ g_x/gH₂ y $\gamma=\phi(I)/Y_{x/H_2}=5$ $D=0.035$ y $S_m=10$, $S(0)=4.19$ g/L, $X(0)=0.13$ g/L, $H_2(0)=0$ mL.

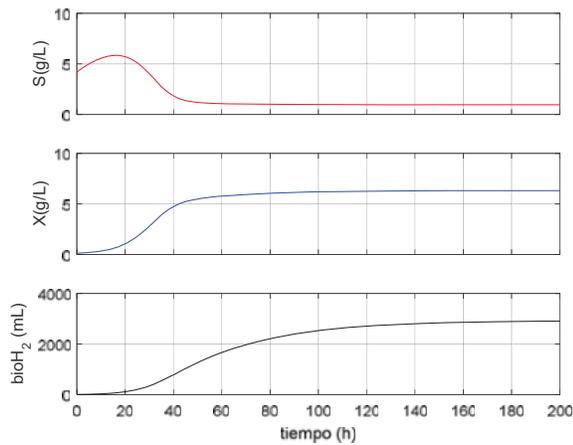


Fig. 1. Dinámica de estados del fotofermentador.

La Figura 1 muestra los perfiles de los estados del modelo para las condiciones nominales de operación. Se puede observar que el sustrato alcanza un valor en estado estacionario cercano a 1 g/L, la biomasa un valor alrededor de 6 g/L, y el H₂ se aproxima a 3000 mL.

Para la estructura del análisis de observabilidad se propone la medición del H₂. En forma interesante, trabajos previos han estudiado el problema de estimación de estados a partir de la medición de la biomasa, sin embargo, actualmente es más factible la medición en línea del H₂. De esta forma el vector de estados medibles es $C=[0 \ 0 \ 1]$, donde 0 corresponde a los no medibles y 1 a los medibles.

Con la estructura propuesta se calcula el gramiano empírico (EMGR) usando los programas desarrollados por Himpe (2018), y del MRR propuesto por Sun y Hahn (2012). Los resultados que se obtienen son:

$$EMGR = 1e^6 * \begin{bmatrix} 0.7482 & 1.1839 & 0.0021 \\ 1.1839 & 1.8868 & 0.0036 \\ 0.0021 & 0.0036 & 0.0 \end{bmatrix}$$

Para este caso el análisis del rango de la matriz es de 3, lo que corresponde con el número de estados del sistema, por lo cual se dice que el sistema es observable con la configuración propuesta del estado medido.

$$MRR = 1e^{13} * \begin{bmatrix} 0.5998 & 0.9505 & 0.0020 \\ 0.9505 & 1.5179 & 0.0034 \\ 0.0020 & 0.0034 & 0.0 \end{bmatrix}$$

Al igual que el análisis con el software EMGR, la matriz de observabilidad da un rango de 3, lo cual indica que el sistema es completamente observable.

La observabilidad a través de geometría diferencial se evalúa al calcular la matriz de observabilidad dada por la Ec. (10). Los resultados son,

$$LIE = \begin{bmatrix} 0.0 & 0.0 & 1.0 \\ 1.0532 & 16.175 & -0.350 \\ 3.0165 & -0.618 & 0.0012 \end{bmatrix}$$

Los resultados simbólicos de las matrices no se presentan por claridad en la presentación y limitaciones de espacio. La Fig. 2 presenta la evaluación del rango a lo largo del tiempo de simulación.

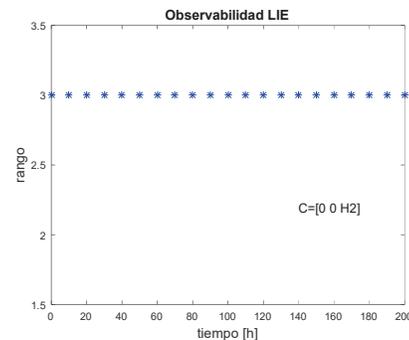


Fig. 2. Análisis de rango con derivadas de Lie.

Los resultados numéricos muestran que se tiene rango completo del sistema a lo largo del tiempo de simulación. Así, la estimación de los estados no medibles, biomasa y sustrato, del caso de estudio considerado son viables a partir de la medición del H₂.

5. CONCLUSIONES

Los bioprocesos han tomado un renovado auge en los últimos años debido a su amplia gama de aplicaciones, incluyendo la producción de biocombustibles. Debido a la complejidad en la operación de este tipo de procesos es fundamental su monitoreo para fines de diagnóstico y operación. Los observadores de estado permiten inferir estados no medibles si el proceso a estudiar cumple con la propiedad de observabilidad. El estudio de observabilidad para sistemas no-lineales, tales como los bioprocesos, es necesario para identificar las variables que se requieren medir para fines de cumplir con la observabilidad. En este trabajo se presentan resultados de observabilidad usando el enfoque de gramiano empírico y de la geometría diferencial para la producción de hidrogeno por medio de foto-fermentación. Los resultados muestran que la observabilidad se cumple con la medición del hidrogeno. Se debe notar que otras herramientas para el análisis de observabilidad, tales como diagramas de inferencia y mapeos de observabilidad, tienen limitaciones para modelos de alto orden y no-lineales, tales como los bioprocesos. Así, el análisis de observabilidad por medio del gramiano empírico es una alternativa que se puede explorar para su aplicación en una amplia gama de bioprocesos al usar soluciones numéricas del modelo del proceso a estudiar.

REFERENCES

- Alexander, R., Campani, G., Dinh, S. and Lima, F. V. (2020). Challenges and opportunities on nonlinear state estimation of chemical and biochemical processes. *Processes* 8(11), 1462.
- Ali, J. M., Hoang, N. H., Hussain, M. A. and Dochain, D. (2015). Review and classification of recent observers applied in chemical process systems. *Comp. Chem. Eng.* 76, 27-41.
- Bastin, G. and Dochain, D. (1990) *On-line estimation and adaptive control of bioreactors*. Elsevier, Amsterdam
- Biechele, P., Busse, C., Solle, D., Scheper, T. and Reardon, K. (2015). Sensor systems for bioprocess monitoring. *Eng. Life Sci.* 15, 469-488.
- Callier, F.M. and Desoer, C.A. (2012). *Linear system theory*. Springer Science & Business Media.
- Dewasme, L., Bogaerts, P. and Wouwer, A. V. (2009). Monitoring of bioprocesses: mechanistic and data-driven approaches. In *Computational Intelligence Techniques for Bioprocess Modelling, Supervision and Control* (pp. 57-97). Springer, Berlin, Heidelberg.
- Dincer, I. and Acar, C. (2015). Review and evaluation of hydrogen production methods for better sustainability. *Int. J. Hydrogen Energy* 40, 11094-11111.
- Dochain, D. (2003). State and parameter estimation in chemical and biochemical processes: a tutorial. *J. Process Cont.* 13, 801-818.
- Hallenbeck, P.C. and Benemann, J.R. (2002). Biological hydrogen production; fundamentals and limiting processes. *Int. J. Hydrogen Energy* 27, 1185-1193.
- Hahn, J. and Edgar, T.F. (2002). An improved method for nonlinear model reduction using balancing of empirical gramians. *Comp. Chem. Eng.* 26, 1379-1397.
- Hangos, K.M., Bokor, J. and Szederkényi, G. (2006). *Analysis and control of nonlinear process systems*. Springer Science & Business Media.
- Himpe, C. (2018). EMGR-the empirical gramian framework. *Algorithms* 11, 91.
- Kalman, R.E. (1960). Contributions to the theory of optimal control. *Bol. Soc. Mat. Mexicana*, 5(2), 102-119.
- King, S., Kang, W. and Xu, L. (2015). Observability for optimal sensor locations in data assimilation. *Int. J. Dyn. Cont.* 3, 416-424.
- Komives, C. and Parker, R.S. (2003). Bioreactor state estimation and control. *Current Op. Biotech.* 14, 468-474.
- Liu, Y.Y., Slotine, J.J. and Barabási, A.L. (2013). Observability of complex systems. *Proc. Nat. Academy Sci.* 110, 2460-2465.
- Luo, Y., Kurian, V. and Ogunnaike, B.A. (2021). Bioprocess systems analysis, modeling, estimation, and control. *Current Op. Chem. Eng.* 33, 100705.
- Luttmann, R., Bracewell, D.G., Cornelissen, G., Gernaey, K. V., Glassey, J., Hass, V.C. and Mandenius, C.F. (2012). Soft sensors in bioprocessing: A status report and recommendations. *Biotech. J.* 7, 1040-1048.
- Lyubenova, V., Kostov, G. and Denkova-Kostova, R. (2021). Model-based monitoring of biotechnological processes-a review. *Processes* 9(6), 908.
- Manish, S. and Banerjee, R. (2008). Comparison of biohydrogen production processes. *Int. J. Hydrogen Energy* 33, 279-286.
- Montanari, A.N. and Aguirre, L.A. (2020). Observability of network systems: A critical review of recent results. *J. Control Autom. Elec. Sys.* 31(6), 1348-1374.
- Nuñez, S., Garelli, F. and De Battista, H. (2012). Sliding mode observer for biomass estimation in a biohydrogen production process. *Int. J. Hydrogen Energy* 37, 10089-10094.
- Pérez, P.A.L., Neria-González, M.I. and López, R.A. (2015). Increasing the bio-hydrogen production in a continuous bioreactor via nonlinear feedback controller. *Int. J. Hydrogen Energy* 40, 17224-17230.
- Powel, N.D. and Morgansen, K.A. (2015). Empirical observability Gramian rank condition for weak observability of nonlinear systems with control. In *2015 54th IEEE Conference on Decision and Control (CDC)* (pp. 6342-6348). IEEE.
- Schügerl, K. (2001). Progress in monitoring, modeling and control of bioprocesses during the last 20 years. *J. Biotech.* 85, 149-173.
- Singh, A.K. and Hahn, J. (2005). Determining optimal sensor locations for state and parameter estimation for stable nonlinear systems. *Ind. Eng. Chem. Res.* 44, 5645-5659.
- van Impe, J.F., Vanrolleghem, P.A. and Iserentant, D.M. (Eds.). (2013). *Advanced instrumentation, data interpretation, and*

control of biotechnological processes. Springer Science & Business Media.

Zhao, L., Fu, H.Y., Zhou, W. and Hu, W.S. (2015). Advances in process monitoring tools for cell culture bioprocesses. *Eng. Life Sci.* 15, 459-468.