



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
INGENIERÍA ELÉCTRICA- CONTROL**

CONTROL DE UNA CLASE DE REACTORES QUÍMICOS Y BIOLÓGICOS

**TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA**

**PRESENTA:
JORGE DÍAZ SALGADO**

**TUTOR:
DR. JESÚS ÁLVAREZ CALDERÓN, UAM-I**

MÉXICO, D. F. NOVIEMBRE 2013

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Jaime Alberto Moreno Pérez

Secretario: Dr. Luis A. Álvarez Icaza Longoria

Vocal: Dr. Jesús Álvarez Calderón

1er. Suplente: Dr. Alejandro Vargas Casillas

2do. Suplente: Dr. Eduardo Castellanos Sahagún

Posgrado de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México.

TUTOR DE TESIS:

Dr. Jesús Álvarez Calderón

FIRMA

Agradecimientos

Al Dr. Jesús Álvarez Calderón por toda su dedicación y paciencia.

Al Dr. Jaime Moreno Pérez por su enorme apoyo y sus valiosas observaciones.

A los doctores Luis Álvarez Icaza, Alejandro Vargas y Eduardo Castellanos por sus valiosos comentarios sobre el trabajo.

A la Dra. Cristina Verde y el Dr. Gerardo Espinosa por la ayuda y el empuje que siempre me dieron para concluir el grado.

A los doctores Edmundo Rocha y Alexander Schaum por su amistad y el excelente grupo de colaboración generado.

A todos mis compañeros de la Facultad y el Instituto de Ingeniería de la UNAM por la convivencia sana y el enorme apoyo.

A mis padres quienes siempre me han apoyado.

A mi esposa por todo su apoyo y su enorme tolerancia y paciencia.

Al CONACyT por las becas otorgadas: (173559) y ayudantía de SNI.

Al Posgrado en Ingeniería y al Instituto de Ingeniería de la UNAM por los apoyos y facilidades ofrecidas como alumno y becario.

Resumen

Este trabajo aborda el problema de control robusto de reactores exotérmicos de tanque agitado y operación continua con reacción única e irreversible. Como es usual en la práctica industrial, el control propuesto utiliza sólo mediciones de volumen y temperatura para regular la temperatura, el volumen y la concentración del reactor manipulando los flujos del refrigerante, de entrada y de salida, respectivamente, y funciona tanto para reactores con cinética de reacción monótona como no-monótona con respecto a concentración. En el trabajo se hace hincapié en las diferencias que el tipo de cinética genera en el análisis, diseño, funcionamiento, desempeño y características del esquema de estimación-control. La aplicación de una técnica constructiva permite determinar las condiciones de solubilidad con significado físico y proponer un modelo dinámico cuasi-lineal (quasi linear dynamic QLD), confeccionado a partir de las propiedades de grado relativo, pasividad y observabilidad en el caso monótono (y detectabilidad en el caso no monótono) del sistema. Este modelo matemático se utiliza como base de diseño de un controlador-observador prealimentado (FF) y retroalimentado por salida (OF) y de múltiples entradas y salidas (MIMO) que: (i) recupera el comportamiento de un controlador prealimentado y retroalimentado por estado (FF-SF) robusto y no lineal, limitado sólo por la convergencia del observador; (ii) constituye una mejora de los esquemas de control PI utilizados en reactores industriales; (iii) es considerablemente más simple e independiente del modelo que el control basado en un EKF o un control geométrico; (iv) esta formado por la combinación de componentes Proporcional-Integral (PI) e Integral (I), y un componente de estimación-control de concentración, y (v) tiene un criterio de estabilidad no local a lazo cerrado acoplado con guías de sintonización convencionales.

La mejora de los esquemas de control PI utilizados en reactores industriales consiste en la adición de bloques adicionales de control (“backstepping” y derivación del “set-point”) que permiten un esquema de control de temperatura en cascada que no requiere de separación dinámica para su funcionamiento y ofrece protección contra el “windup”

El control propuesto fue diseñado para lograr la máxima linealidad, descentralización, robustez e independencia de modelo matemático, de tal modo que permita su aplicación industrial. Los desarrollos metodológicos asocia-

dos con el control propuesto establecen: (i) una conexión formal entre las herramientas de control no lineal avanzado y control convencional de este tipo de reactores, (ii) las particularidades y limitaciones que han de tomarse en cuenta en el diseño dependiendo del tipo de cinética de reacción y (iii) una explicación analítica que muestra porque funcionan correctamente los esquemas de control convencionales. El control propuesto fue probado en simulación numérica utilizando dos reactores inestables a lazo abierto, uno por cada tipo de cinética.

Abstract

The problem of controlling continuous exothermic stirred tank jacketed reactors with single irreversible reaction is addressed. As usual in industrial practice, the designed controller regulates volume, temperature and concentration, using only temperature and volume measurements, manipulating feed, exit and coolant flowrates. The solution was proposed for reactors with monotonic and non-monotonic kinetics with respect to reactant concentration, focusing in the differences that this property generates in the controller analysis, desing and performance. The application of a constructive control-observer design procedure permits to establish the solvability conditions with physical meaning and leads to a quasi-linear dynamic (QLD) model designed by considering relative degree, passivity and observability (for monotonic and detectability for non-monotonic case) properties. This mathematical model leads to a MIMO control-observer scheme that: (i) recovers the behavior of a robust nonlinear feedforward state-feedback (FF-SF) controller, (ii) constitutes an add-on to the PI control scheme commonly used in industrial reactors, (iii) is considerably simpler and model independent than an geometric or EKF based controllers, (iv) consists of a combination of Proportional-Integral (PI), and Integral (I) plus a concentration estimation components, and (v) has a closed-loop nonlocal stability criterion coupled with conventional-like tuning guidelines.

The add-on to the PI control scheme commonly used in industrial reactors consists in additional backstepping and set-point derivator blocks that results in a temperature cascade controller scheme that does not need dynamic separation between primary and secondary to work properly and has anti-windup protection.

The proposed controller was designed with emphasis on the achievement of linearity, decentralization, robustness and model independency features, that permits industrial applicability. The methodological developments associated with the proposed controller formally: (i) connects the advanced nonlinear and conventional (linear-inventory) control approaches for this type of reactors, (ii) shows the particularities and limitations to be taken into account in the controller design depending on the type of reaction and (iii) establishes an analytical explanation of why the conventional controllers work

appropriately. The approach is tested with a pair of open-loop unstable reactor examples (monotonic and non monotonic) through simulations.

Índice General

1	Introducción	1
1.1	Motivación	1
1.2	Estado del arte	2
1.3	Planteamiento del problema	5
1.4	Objetivos	5
1.5	Contribuciones	6
1.6	Organización del trabajo	7
2	Formulación del Problema	9
2.1	Reactores tipo CSTR	9
2.2	Análisis de las propiedades intrínsecas del reactor CSTR	16
2.2.1	Controlabilidad local	18
2.2.2	Análisis de las propiedades de Observabilidad	19
2.2.3	Detectabilidad	21
2.2.4	Mapa de Estimabilidad de estado con el modelo detallado	24
2.2.5	Resumen	29
3	Diseño del controlador no lineal de estado del reactor CSTR	30
3.1	Control Geométrico.	30
3.2	Control Pasivo	36
3.2.1	Rediseño del controlador por optimalidad inversa	37
3.2.2	Resumen	42

4	Diseño del controlador de salida propuesto para el reactor con cinética monótona	43
4.1	Control prealimentado y por retroalimentación de Salida (FF-OF) implementado con un Filtro Extendido de Kalman	44
4.2	Modelo matemático para el diseño del controlador FF-OF . .	49
4.2.1	Observabilidad de estado-entradas desconocidas	50
4.2.2	Modelo quasi lineal y descentralizado (QLD)	53
4.3	Control prealimentado y por retroalimentación de estado [Feed-forward State-Feedback (FF-SF)]	57
4.4	Control prealimentado y por retroalimentación de Salida [Feed-forward Output-Feedback (FF-OF)] propuesto	59
4.5	Estabilidad a lazo cerrado y sintonización	64
4.6	Control QLD FF-OF escrito en términos de elementos PI e I .	68
4.7	Ejemplo de Aplicación (reactor monótono)	72
4.7.1	Descripción del reactor de prueba	72
4.7.2	Simulación y sintonización	74
4.7.3	Comportamiento nominal.	75
4.7.4	Comportamiento Robusto	76
5	Diseño del controlador de salida propuesto para el reactor con cinética no monótona	85
5.1	Modelo matemático para el diseño del controlador FF-OF . .	86
5.1.1	Observabilidad con entradas desconocidas	86
5.1.2	Modelo quasi lineal y descentralizado (QLD)	90
5.2	Control prealimentado y por retroalimentación de estado (FF-SF) con el modelo quasi-lineal dinámico (QLD)	93
5.3	Control prealimentado y por retroalimentación de salida [Feed-forward Output-Feedback (FF-OF)]	95
5.3.1	Control escrito en términos de componentes PI e I . . .	99
5.4	Estabilidad a lazo cerrado y sintonización	101
5.5	Resumen	105
5.6	Ejemplo de Aplicación no-monótono	105
5.6.1	Descripción del reactor de prueba	105
5.6.2	Análisis de la dinámica isotérmica	107
5.6.3	Simulación y sintonización	109

5.6.4	Comportamiento nominal.	110
5.6.5	Comportamiento Robusto	111
5.6.6	Comportamiento nominal y robusto sin el lazo de con- centración	113
6	Conclusiones	125
	Bibliografía	128
A	Balance de Materia	136
B	Observador de orden reducido	139
C	Dinámica de error a lazo cerrado: caso monótono	141
C.1	Dinámica de error de regulación de concentración	144
C.2	Dinámica de error de estimación de concentración	146
C.3	Dinámica de error de regulación de volumen	148
C.4	Dinámica de error de estimación de volumen	149
C.5	Dinámica de regulación de temperatura	151
C.6	Dinámica de error de estimación de temperatura	151
C.7	Dinámica de error de regulación de temperatura de camisa . .	152
C.8	Dinámica de error de estimación de temperatura de camisa . .	153
D	Dinámica de error a lazo cerrado: caso no monótono	157
D.1	Dinámica de error de estimación de concentración	157
D.2	Dinámica de error de regulación de concentración	160
E	Deducción de condiciones de estabilidad para el caso monótono	163
F	Deducción de condiciones de estabilidad para el caso no monótono	168
G	Deducción del control propuesto en la forma de bloques PI e I para el caso monótono	172
G.1	Cálculo del control de volumen en la forma PI	172
G.2	Cálculo del control de concentración en la forma PI	175
G.3	Cálculo del control primario de temperatura en la forma PI . .	178
G.4	Cálculo del control secundario de temperatura en la forma PI	181

H Dedución del control propuesto en la forma I en lazo de control de concentración para el caso no monótono	189
---	-----

Índice de Figuras

2.1	Reactor (STR) “Stirred Tank Reactor” con camisa de enfriamiento	10
2.2	Concentración vs cinética de reacción monótona y no monótona a temperatura constante	14
4.1	Diagrama de bloques del control propuesto con elementos convencionales PI e I	78
4.2	Respuesta del reactor con condiciones iniciales $x_{0E}(-)$ y $x_{0I}(- -)$	79
4.3	Proyección en el plano $c - T$ del plano de fase del reactor con el control MB (4.148).	80
4.4	Respuesta a lazo cerrado con los controles NLP FF-SF (3.31)-(3.35)(-), FF-OF+FEK (4.17)-(4.17)(- -) y QLD FF-OF (4.111)-(4.114)(\dots).	81
4.5	Concentración, tasa de reacción, tasa de disipación de calor y concentración de entrada del control QLD FF-OF (4.111)-(4.114), valores actuales (-) y valores estimados (- -).	82
4.6	Respuesta a lazo cerrado con el control QLD FF-OF (4.111)-(4.114) con diferentes pares de ganancias para el control en cascada de temperatura $(k_T, k_j) = (3, 12)(-), (6, 6)(- -)$ y $(12, 12)(\dots)$	83
4.7	Respuesta robusto a lazo cerrado con los controles NLP FF-SF (3.31)-(3.35)(-), FF-OF+FEK (4.17)-(4.29)(- -) y QLD FF-OF (4.111)-(4.114)(\dots).	84
5.1	Diagrama de bloques del control prpuesto con elementos convencionales PI e I	115
5.2	Proyección en el plano $c - T$ del plano de fase del reactor con el control MB (4.148).	116
5.3	Solución gráfica de la dinámica isotérmica del reactor de prueba con cinética no monótona.	117

5.4	Respuesta del reactor con el control ideal MB y condiciones iniciales: x_{0I} (-) y x_{0E} (-)	118
5.5	Respuesta a lazo cerrado del reactor con los controles NL FF- SF (3.31)-(3.35)(-), FF-OF+EKF (4.17)-(4.29)(- -) y QLD FF-OF (5.59)-(5.61)(\dots)	119
5.6	Señales actuales (-) y estimadas (- -) de concentración, cinética de reacción, tasa de intercambio de calor y factor de contrac- ción con el control QLD FF-OF (5.59)-(5.61)	120
5.7	Respuesta a lazo cerrado con el control QLD FF-OF (5.59)- (5.61) con diferentes pares de ganancias para el control en cas- cada de temperatura $(k_T, k_j) = (3, 12)(-)$, $(6, 6)(- -)$ y $(12, 12)(\dots)$. 121	
5.8	Respuesta robusta a lazo cerrado con los controles NL FF- SF (3.31)-(3.35)(-), FF-OF+EKF (4.17)-(4.29) (- -) y QLD FF-OF (5.59)-(5.61) (\dots)	122
5.9	Respuesta nominal a lazo cerrado del reactor con el control QLD FF-OF (5.59)-(5.61) (-), y con $q_e = \bar{q}_e$ (\dots)	123
5.10	Respuesta robusta a lazo cerrado del reactor con el control QLD FF-OF (5.59)-(5.61) (-), y con $q_e = \bar{q}_e$ (\dots)	124

Índice de Tablas

2.1	Formas de operacion del reactor STR	11
4.1	Puntos de equilibrio del reactor monótono con entradas nominales	73
5.1	Puntos de equilibrio del reactor no monótono con entradas nominales	108
5.2	Comparación de las señales, funciones y parámetros necesarios por los algoritmos de control	112

Capítulo 1

Introducción

1.1 Motivación

En el área de control de procesos hoy en día se realizan diversos esfuerzos para mejorar los procesos de producción. Los principales objetivos consisten en: reducir los costos de producción, aumentar la calidad de los productos y mejorar la robustez y seguridad del proceso mismo. En el área de ingeniería de control estos objetivos se traducen básicamente en: (i) aumentar la rapidez de convergencia, (ii) disminuir el error en estado permanente, (iii) lograr la mayor robustez del sistema ante incertidumbres paramétricas y entradas no medidas y (iv) obtener un sistema de control que maximice la producción. Sin embargo alcanzar estos objetivos es complejo, básicamente porque los objetivos se contraponen entre sí. Los esfuerzos por lo tanto se han enfocado en establecer el mejor compromiso entre los diferentes objetivos.

Una gran cantidad de materiales químicos y biológicos se producen en reactores de tanque agitado STR (stirred tank reactor) por lo que probablemente este sea el sistema más estudiado dentro del área control de procesos. Los estudios incluyen de manera conjunta el diseño, la operación y el control, pues la viabilidad económica de los procesos de manufactura depende de las tres partes.

En general el reactor de tanque agitado presenta varios problemas operacionales debidos a características complejas que éste presenta a lazo abierto, entre las que se incluyen: multiplicidad de puntos de equilibrio, oscilaciones no lineales, comportamiento de ignición/extinción, sensibilidad paramétrica y hasta comportamiento caótico [19],[2]. Además, en el caso de reactores ex-

otérmicos adiabáticos, la generación de calor da pie a fenómenos de reacción y de transporte de calor muy complejos que se reflejan como: acoplamientos asimétricos de las entradas con las salidas y a generación de bifurcaciones y ciclos límite [21],[3].

Por otro lado los reactores STR pueden tener una cinética de reacción monótona o no monótona en concentración dependiendo del tipo de reacción. La mayor parte de las cinéticas son monótonas, es decir a mayor cantidad de reactante se genera mas producto. Sin embargo ciertas reacciones tienen un efecto de inhibición que ante grandes cantidades de reactante reducen la del producto. Las cinéticas no monótonas aparecen en reactores biológicos [34], reactores catalíticos [1], y reactores de polimerización [32].

Un reactor con cinética no monótona presenta problemas de observabilidad ya que no es local ni globalmente observable, lo que limita el uso de esquemas de observación, basados en observabilidad local e instantánea [37], y que son necesarios para controlar la concentración en lazo cerrado.

En resumen, el control robusto de los reactores STR representa un importante reto dentro del área de control de procesos, donde las normas de producción y seguridad cada día son mas exigentes.

1.2 Estado del arte

El problema de control de reactores STR ha servido en el ámbito académico como mesa de prueba de una gran cantidad de técnicas de control, observación y estimación. Se han hecho innumerables aportaciones al estudio del control de este tipo de reactores [14][36][6]. En particular el problema de control por retroalimentación de salidas para el caso de reactores STR exotérmicos en operación continua CSTR (continuous stirred tank reactor) ha generado aportaciones teóricas [19][4][26], simuladas [24][30][9][10] y experimentales [13][7]. La mayoría de las aportaciones están basadas en el uso de un modelo dinámico que combina un control geométrico por retroalimentación de estados (SF) [16][15], control por modelo predictivo (MPC) [22] [23], y control por inventarios [8], acoplados con un observador de concentración tipo filtro extendido de Kalman (extended Kalman filter EKF) [24][63], tipo Luenberger[16], o tipo lazo abierto [31]. La mayoría de estas aportaciones carecen de una prueba de estabilidad rigurosa [61]. Por otro lado, sólo partes del problema de múltiples entradas múltiples salidas (multiple input multiple output MIMO) han sido resueltas [16], y la mayor parte de los estudios de

reactores químicos CSTR se han enfocado sólo en reactores con cinética monótona (tipo Arrhenius) y poco trabajo se ha realizado en reactores químicos con cinéticas de reacción no monótonas (tipo Langmuir-Hinshelwood).

En el caso de reactores biológicos STR en operación por semi-lote (fed-batch) con cinéticas de reacción no monótonas (tipo Haldane) la mayoría de los estudios se han enfocado en el diseño de observadores de estado a lazo abierto. El problema de control-observación se ha resuelto utilizando un observador local y operando al reactor en un punto suficientemente lejano de la máxima cinética de reacción [66],[67],[68]. Esto permite que el sistema control-observador funcione, pero implica una reducción de la productividad.

Por otro lado, se ha logrado controlar un reactor biológico de fermentación con cinética no monótona utilizando un algoritmo de conmutación dependiendo si la reacción está en la región isotónica o antitónica, pero el algoritmo falla a bajas concentraciones de substrato [20], [39].

Recientemente en el contexto de control por retroalimentación de salidas en columnas de destilación [50] y reactores de polimerización con cinética monótona [31][47] se ha utilizado exitosamente la metodología de control constructivo para el diseño de controles MIMO que logran recuperar el comportamiento de controles robustos por retroalimentación de estados (state feedback SF) basados en el modelo perfecto.

También recientemente, en el caso de reactores con cinética no monótona, se mostró que es posible utilizar un EKF para observar la concentración y acoplar con un control por retroalimentación de estado, aún si se opera en la región de máxima producción, sin embargo, la desventaja de este enfoque es la poca robustez que presenta el controlador y la falta de una prueba formal de estabilidad [77]. En el contexto de reactores biológicos y reactores catalíticos con inhibición, se ha mostrado que explotando la propiedad de detectabilidad es posible diseñar un observador global que, después de un tiempo finito, recupere el verdadero valor de concentración [37].

En resumen, del estado del arte se sabe que: (i) se puede estabilizar al reactor CSTR regulando la temperatura con un control en cascada PI convencional, (ii) la separación dinámica del control en cascada puede ser removida utilizando un control pasivado [12], (iii) la concentración en reactores con cinética monótona puede ser estimada rápidamente, limitada sólo por el ruido de medición y las dinámicas no modeladas, utilizando un observador no lineal como un (EKF) basado en una forma de observabilidad integral [60] o un observador tipo Luenberger basado en una forma de observabilidad instantánea [25], (iv) los dos observadores mencionados son

fuertemente dependientes del modelo matemático del reactor, en particular de las funciones de cinética de reacción y transferencia de calor que, por lo general, son altamente inciertas, y (v) es posible diseñar observadores de concentración tipo lazo abierto [74] o tipo EKF [77] y acoplarlos con un control no lineal SF para controlar reactores con cinética no monótona, siendo ambos observadores los límites del compromiso entre rapidez de convergencia y dependencia del modelo matemático, respectivamente.

Sin embargo, aunque se ha avanzado notablemente en el ámbito académico en el entendimiento de la problemática de este tipo de reactores y en la generación de soluciones, sigue existiendo un gran rechazo al uso de estas propuestas en la práctica industrial. Las razones básicamente son la gran complejidad que estos esquemas presentan para su implementación y la falta de fiabilidad de los mismos. Este trabajo busca, entre otras cosas, proponer una solución basada en técnicas de análisis y diseño de control no lineal avanzado reescritas en una forma lo mas parecida posible a la utilizada en los ambientes industriales y, por otro lado, reglas de sintonización basadas en una prueba formal de estabilidad para que la propuesta de solución tenga un alto nivel de fiabilidad.

Los reactores CSTR industriales comúnmente se controlan manipulando el flujo de salida y de refrigerante con esquemas de control proporcional-integral (PI) descentralizados para la regulación de volumen y temperatura respectivamente. Generalmente, el control de temperatura es un esquema de control en cascada maestro-esclavo. La concentración se deja a lazo abierto o se regula utilizando un esquema de control supervisorio y modificando manualmente el gasto de entrada, ya que por cuestiones económicas y prácticas no resulta viable medir en línea la concentración de reactante o producto [3],[4]. La limitante económica es el elevado costo de un cromatógrafo, mientras que la limitación práctica es el inevitable retraso en tiempo que tiene la medición de concentración, por lo cual suelen utilizarse mediciones fuera de línea. Estos esquemas industriales ofrecen ventajas y desventajas, entre las primeras estan: (i) son muy simples de sintonizar, (ii) tienen una dependencia mínima de modelado y (iii) presentan una gran robustez. Entre las desventajas estan: (i) el esquema de control en cascada utilizado en el lazo de temperatura limita el desempeño del lazo al requerir de una separación dinámica entre el maestro y el esclavo, (ii) no se logra un buen control de concentración todo el tiempo, lo que se traduce en aumento de costos de operación y/o baja calidad del producto y (iii) la sintonización de los controladores está basada en la experiencia y la prueba y el error.

El estado del arte da cuenta de que el problema de control de reactores CSTR ya ha sido resuelto parcialmente, tanto a nivel teórico, práctico e industrial. Sin embargo, también evidencia que existen puntos importantes que atender, pues la mayor parte de las aportaciones:

1. Se analizaron, diseñaron y probaron para una dinámica simplificada del reactor.
2. Carecen de un desarrollo sistemático y no son fácilmente implementables.
3. Carecen de una prueba formal de estabilidad a lazo cerrado y de guías de sintonización prácticas y
4. Carecen de un análisis de condiciones bajo las que se puede resolver el problema y una interpretación física de las mismas.

Asimismo, la comparación entre los esquemas de control industriales y los reportados en la literatura especializada muestran una gran diferencia entre ambos enfoques, y motivan las siguientes preguntas: ¿porqué funcionan los esquemas de control PI industriales?, y ¿se pueden mejorar estos esquemas utilizando teoría de control avanzado?

1.3 Planteamiento del problema

El estado del arte permite definir el problema a resolver: diseñar un controlador por retroalimentación de salidas que auxiliado por las entradas medidas (posiblemente variantes en el tiempo) y un modelo matemático adecuado, regule al reactor CSTR exotérmico y de reacción simple alrededor de un estado nominal $\bar{\mathbf{z}} = [\bar{V}, \bar{T}, \bar{c}]$ (posiblemente inestable a lazo abierto), con estabilidad robusta a lazo cerrado (con respecto a errores de modelado y entradas exógenas), para cualquier tipo de cinética de reacción, monótona o no monótona.

1.4 Objetivos

Las consideraciones anteriores permiten plantear que el problema se pretende solucionar cumpliendo los siguientes objetivos:

1. Realizar un análisis de controlabilidad, observabilidad y detectabilidad de la clase de reactores para determinar las limitaciones que se imponen en estas propiedades del sistema dependiendo el tipo de cinética.

2. Identificar y analizar las condiciones de resolubilidad dándoles una interpretación física.
3. Explotar los mecanismos estructurales inherentes al modelo matemático para obtener un modelo matemático simplificado que a su vez se utilice para el diseño del esquema de estimación-control.
4. Establecer una prueba formal de estabilidad y guías de sintonización del control propuesto.
5. Establecer una conexión formal entre los esquemas de control industriales y los de control no lineal avanzado.
6. Diseñar un controlador que tenga aplicabilidad industrial al lograr la mayor linealidad, descentralización, robustez e independencia del modelo matemático y una sintonización simple.
7. Eliminar el requerimiento de separación dinámica del control en cascada de temperatura.
8. Mejorar el esquema de control PI ampliamente utilizado en la industria.
9. Analizar las diferencias y limitaciones que el tipo de cinética producen en el diseño, y desempeño del esquema de control.
10. Comparar el desempeño en simulación del esquema propuesto contra un controlador por retroalimentación de estados.

1.5 Contribuciones

Como ya se ha mencionado, el reactor CSTR ha sido ampliamente estudiado a largo de varias décadas con trabajos teóricos, simulados y experimentales. ¿Por qué entonces un trabajo más? Este trabajo aporta tres contribuciones importantes al área de control de reactores tipo CSTR. Las primeras dos, son contribuciones que dan más luz sobre el entendimiento de los problemas asociados con el control de este tipo de reactores. Una vez entendida la problemática se plantea una contribución adicional que consiste en mejorar los esquemas de control ya existentes.

Utilizando teoría de control avanzado se logra establecer una conexión formal entre los esquemas de control industriales y los de control no lineal avanzado. Con ello se pueden explicar dos cosas: (i) ¿por qué se utilizan exitosamente esquemas simples y mínimamente dependientes del modelo para controlar la gran mayoría de reactores CSTR, que son sistemas no lineales complejos y presentan diferentes tipos de cinéticas de reacción? y (ii) ¿qué particularidades y limitaciones han de tomarse en cuenta en el diseño y sin-

tonización del esquema de control-estimación dependiendo del tipo de cinética de reacción?

La tercer contribución se logra a partir de la aplicación de una técnica de diseño de control constructivo. La aplicación de esta técnica posibilita la proposición un modelo dinámico confeccionado a partir de las propiedades de grado relativo, pasividad y observabilidad/detectabilidad que permite la inclusión de componentes adicionales en los lazos de control de concentración y temperatura con respecto a los esquemas de control industrial convencional. Estos componentes logran mejoras (que no son triviales ni convencionales) en el desempeño, disminución del error en estado estacionario y aumento de robustez ante ruido en las mediciones y perturbaciones paramétricas y de entradas exógenas.

1.6 Organización del trabajo

El trabajo está organizado del siguiente modo. En el segundo capítulo se describen los reactores CSTR y se presenta el modelo matemático de este tipo de reactores. Después se analizan las propiedades de controlabilidad, observabilidad y detectabilidad de los reactores CSTR. En el capítulo tres se diseña un control geométrico basado en determinar la inversa de la planta con el modelo exacto que además sirve para determinar las condiciones de resolubilidad del problema de control y darles interpretación física. A continuación se diseña un control pasivo por retroalimentación de estados, que constituye el primer eslabón del enfoque constructivo y que sirve como referencia del mejor desempeño que se puede esperar en un controlador con estructura pasiva. En el capítulo cuatro se diseña un control por retroalimentación de salidas acoplado con un EKF que sirve como un sistema de referencia para comparar el desempeño del sistema de control. A continuación, se obtiene un modelo matemático simplificado y con la ayuda de éste se diseña un control prealimentado y por retroalimentación de salida aplicando diversas herramientas de control constructivo y se reescribe en la forma de controladores PI e I y un componente de control-estimación de concentración. En seguida, se establece la dinámica de error y las condiciones de estabilidad del sistema a lazo cerrado y con base en esta dinámica se establecen guías de sintonización. Finalmente se comparan los tres controladores propuestos con un reactor representativo en forma simulada. En el capítulo cinco se hace lo propio con el reactor con cinética no monótona. Finalmente se presentan las

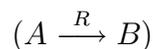
conclusiones del trabajo.

Capítulo 2

Formulación del Problema

2.1 Reactores tipo CSTR

Los reactores de tanque agitado (stirred tank reactor STR) (Fig. 2.1) consisten básicamente en un tanque donde se alimenta con un cierto gasto de entrada q_e uno o varios reactantes con una cierta concentración y temperatura de entrada y cuyo contenido es mezclado de forma homogénea de tal forma que se puede considerar que la concentración de los reactantes y la temperatura del reactor son uniformes en todo el tanque. Dentro del tanque se realiza una reacción que transforma él o los reactantes en uno o varios productos y estos salen del reactor con un gasto de salida q y una concentración de producto. Al reactor se le denomina de reacción simple e irreversible si sólo se introduce un reactante (A) y sólo se genera un producto (B)



donde R es la velocidad de reactante convertido en producto debido a la reacción química. Si la reacción es exotérmica y el calor generado no puede ser removido de forma natural por el flujo de salida q_j y/o disipado por el medio ambiente, el reactor tiene alrededor una camisa de enfriamiento con temperatura T_j donde se fuerza a circular algún fluido (generalmente agua) para remover el calor excesivo.

El reactor STR puede ser operado de tres formas distintas: en forma continua, en lote y en semi-lote. La operación continua significa que los flujos de entrada y salida son iguales de tal modo que el volumen V se mantiene constante, y el reactor puede estar operando por tiempo indefinido. En la

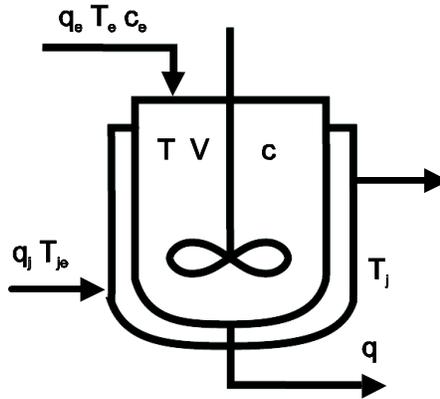


Figura 2.1: Reactor (STR) “Stirred Tank Reactor” con camisa de enfriamiento

operación por lote (o batch) el reactor también trabaja a volumen constante pero no hay entrada ni salida de material durante la reacción, de tal modo que una vez consumido el reactante se detiene la operación. Finalmente en la operación por semi-lote (o fed-batch) el reactante se va añadiendo al reactor hasta llegar a un volumen máximo (pues no hay flujo de salida) donde se detiene la operación, o bien hasta que se logre la composición deseada del producto. En la Tabla 2.1 se pueden observar las características de cada una de las tres formas de operación. Cuando el STR trabaja en forma continua se le denomina CSTR (Continuos Stirred Tank Reactor).

El modelo dinámico del reactor, suponiendo que las propiedades físicas son constantes, surge a partir de cuatro balances [19]: (i) balance del i -ésimo componente dentro del reactor

$$\begin{aligned}\dot{C} &= -R(C, T) + (q_e/V) [C_e(t) - C] \\ C(0) &= C_0\end{aligned}$$

(ii) balance de energía del reactor con su alrededor,

Tabla 2.1: Formas de operacion del reactor STR

forma de operación	gastos	volumen	tiempo de operación
continua	$q = q_e > 0$	$V = \bar{V}$	$t \in [0, \infty)$
lote	$q = q_e = 0$	$V = V_0$	$t \in [0, t_f)$
semi-lote	$q = 0, q_e > 0$	$V = V(t)$	$t \in [0, t_f)$

$$\dot{T} = [(-\Delta H) / (\rho_m c_p)] R(C, T) + (q_e / V) (T_e - T) - [AU(C) / (\rho_m V c_p)] (T - T_j)$$

$$T(0) = T_0$$

(iii) balance de energía en la camisa de enfriamiento

$$\dot{T}_j = [AU(C) / (\rho_j V_j c_{pj})] (T - T_j) + [(q_j \rho_c c_{pc}) / (\rho_j V_j c_{pj})] (T_{je} - T_j)$$

$$T_j(0) = T_{j0}$$

y (iv) balance de materia que entra y sale del reactor (Apéndice A)

$$\dot{V} = q_e - q - \pi$$

$$V(0) = V_0$$

donde

Q_r	calor de reacción por mol de reactante [Cal/mol]
V	volumen del reactor [L]
T	temperatura de la mezcla reaccionante [K]
T_j	temperatura de la camisa [K]
C	concentración del reactante [mol/L]
R	tasa de reacción molar por unidad de volumen [mol/min L]
U	coeficiente de transporte de calor [Cal/m ² min K]
V_j	volumen de camisa [L]
ρ_m	densidad de la mezcla [kg/L]
ρ_c	densidad del refrigerante [kg/L]
ρ_j	densidad de la camisa [kg/L]
ρ_1	densidad del reactante puro [kg/L]
ρ_2	densidad del producto [kg/L]

c_p	capacidad calorífica de la mezcla por unidad de masa [Cal/kg K]
c_{pj}	capacidad calorífica de la camisa por unidad de masa [Cal/kg K]
c_{pc}	capacidad calorífica del refrigerante por unidad de masa [Cal/kg K]
A	área de intercambio entre el reactor y la camisa [m ²]
π	tasa de contracción volumétrica [L/min]
C_e	concentración de entrada [mol/L]
T_e	temperatura de alimentación [K]
T_{je}	temperatura de alimentación de la camisa [K]
q	gasto volumétrico de salida [L/min]
q_e	gasto volumétrico de entrada [L/min]
q_j	gasto volumétrico de refrigerante [L/min]

Introduciendo las siguientes definiciones:

$$c = \frac{C}{C^0} []$$

$$c_e = \frac{C_e}{C^0} []$$

$$\gamma(c, T, T_j, V) : = \frac{AU(c, T, T_j)}{\rho_m V c_p} \left[\frac{1}{\text{min}} \right]$$

$$\varpi = \frac{\rho_m c_p}{\rho_j V_j c_{pj}} \left[\frac{1}{L} \right]$$

$$\varpi_j = \frac{\rho_c c_{pc}}{\rho_j V_j c_{pj}} \left[\frac{1}{L} \right]$$

$$\Delta : = \frac{Q_r C^0}{\rho_m c_p} [K]$$

$$\rho(c, T) : = \frac{R(c C^0, T)}{C^0} \left[\frac{1}{\text{min}} \right]$$

donde:

C^0	concentración del reactante puro [mol/L]
c	concentración de reactante adimensional []
c_e	concentración de entrada adimensional []
Δ	aumento adiabático de temperatura [K]
γ	función de dilución de calor del reactor [1/min]
ρ	tasa de reacción en términos de concentración adimensional [1/min]

el modelo dinámico puede reescribirse como sigue:

$$\dot{V} = -\pi(c, T, V) + q_e - q := f_V(c, T, V, q_e, q), \quad y_V = z_V = V \quad (2.1)$$

$$\dot{T} = \Delta\rho(c, T) - (q_e/V)(T - T_e) - \gamma(c, T, V, T_j)(T - T_j) := f_T(c, T, V, T_j, T_e, q_e) \quad (2.2)$$

$$y_T = z_T = T \quad (2.3)$$

$$\dot{T}_j = \varpi V \gamma(c, T, V, T_j)(T - T_j) - \varpi_j q_j (T_j - T_{je}) := f_j(c, T, V, T_j, T_{je}, q_j) \quad (2.4)$$

$$y_j = T_j \quad (2.5)$$

$$\dot{c} = -\rho(c, T) + (q_e/V)(c_e - c) := f_c(c, T, V, q_e, c_e), \quad z_c = c \quad (2.6)$$

donde:

ϖV razón de capacidad calorífica reactor/camisa [/]

$\varpi_j q_j$ tasa de disipación de calor de la camisa [1/min]

Cabe señalar que en la práctica industrial, la tasa de reacción ρ , la tasa de dilución de calor γ y la tasa de contracción volumétrica π son funciones, generalmente no lineales e inciertas, de los estados. Además, dependiendo el tipo de reacción la tasa (o cinética) de reacción del reactor ρ puede ser monótona (isotónica) con derivada positiva respecto a concentración, es decir una función siempre creciente

$$\frac{\partial}{\partial c} \rho(c, T) > 0$$

o no monótona, es decir, en una parte isotónica (creciente) y en otra parte antitónica (decreciente), por lo que para este tipo de reactores existe una región en el espacio de estados Ω donde la concentración de reactante es máxima c^* , es decir su derivada es cero.

$$\Omega = \{\mathbf{x} \in \mathbf{X} \mid \rho_c(c, T) := \frac{\partial \rho(c, T)}{\partial c} = 0\}$$

$$c^* = \kappa(T) \ni \frac{\partial}{\partial c} \rho[\kappa(T), T] = 0$$

Para vizualizar gráficamente la diferencia entre ambos tipos de cinéticas se muestra el comportamiento isotérmico de ambos tipos de cinéticas en la Fig. 2.2.

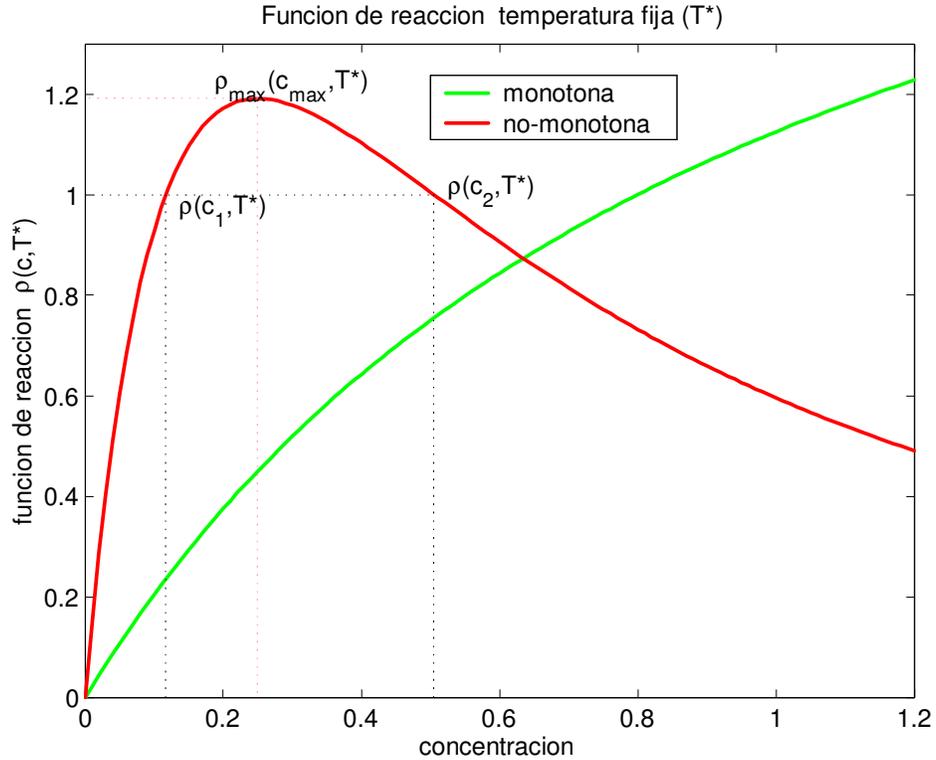


Figura 2.2: Concentración vs cinética de reacción monótona y no monótona a temperatura constante

El modelo matemático (2.1) puede escribirse en variables de estado, donde: los *estados* (x) son la concentración (adimensional) de reactante (c), temperatura del reactor (T), temperatura de la camisa (T_j), y el volumen de la mezcla (V). Las *entradas de control* (u) son los flujos de entrada (q_e) de salida (q) y de refrigerante (q_j). Las *salidas reguladas* (z) son la concentración (c), la temperatura (T), y el volumen (V). Las *salidas medidas* (y) son el volumen (V), y las temperaturas del reactor (T) y de la camisa de enfriamiento (T_j). Las *entradas medidas* (w) son la temperatura de alimentación del reactor (T_e) y de la camisa (T_{je}), y la entrada no medida d es la concentración de entrada (c_e). El vector de *entradas del sistema* (v) se forma con las *entradas de control* (u) y las *entradas exógenas* (w y d).

En notación compacta el modelo del reactor (2.1) puede escribirse como:

$$\dot{x} = f(x, u, w, d), \quad x(0) = x_0 \quad (2.7)$$

$$y = h(x) = C_y x \quad (2.8)$$

$$z = h_z(x) = C_z x \quad (2.9)$$

donde

$$f = [f_v, f_T, f_j, f_c]^T$$

$$x = [c, T, T_j, V]^T \in X$$

$$y = [T, T_j, V]^T \in Y$$

$$z = [c, T, V]^T \in Z$$

$$d = c_e \in D$$

$$u = [q_e, q, q_j]^T \in U$$

$$w = [T_e, T_{je}]^T \in W$$

$$C_y = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad C_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

o en función de las entradas del sistema:

$$\dot{x} = f(x, v), \quad x(0) = x_0, \quad (2.10)$$

$$y = h(x) = C_y x, \quad z = h_z(x) = C_z x \quad (2.11)$$

donde:

$$v = [u^T, w^T, d]^T \in V$$

El principio de conservación de materia y energía y la segunda ley de la termodinámica aplicados en el modelo matemático (2.1) permiten establecer las siguientes restricciones de operación a las entradas exógenas, señales de control y estados:

$$\begin{aligned}
c_e^- &\leq c_e \leq 1 \\
T_e^- &\leq T_e \leq T_e^+ \\
T_{je}^- &\leq T_{je} \leq T_{je}^+ \\
q_j^- &\leq q_j \leq q_j^+ \\
q_e^- &\leq q_e \leq q_e^+ \\
q^- &\leq q \leq q^+ \implies 0 < c < 1 \\
V^- &< V < V^+ \\
T_j^- &< T_j < T_j^+ \\
\min(T_j^-, T_e^-) &= T^- < T < T^+ = \max(T_j^+, T_e^+)
\end{aligned}$$

El reactor puede tener multiplicidad de puntos de equilibrio y posiblemente el punto de regulación es un punto de equilibrio inestable a lazo abierto. Matemáticamente el problema de control consiste en regular al reactor alrededor del valor deseado del vector estado \bar{x} junto con las entradas nominales $(\bar{u}, \bar{w}, \bar{d})$ tal que:

$$f(\bar{x}, \bar{u}, \bar{w}, \bar{d}) = 0 \quad (2.12)$$

$$x = [\bar{c}, \bar{T}, \bar{T}_j, \bar{V}]^T, \quad \bar{d} = \bar{c}_e, \quad \bar{u} = [\bar{q}_e, \bar{q}, q_j]^T, \quad \bar{w} = [\bar{T}_e, \bar{T}_{je}]^T$$

Metodológicamente se busca resolver el problema de control junto con la identificación de las condiciones de solución, y su respectiva interpretación física.

2.2 Análisis de las propiedades intrínsecas del reactor CSTR

El análisis de las propiedades de controlabilidad y observabilidad del reactor CSTR es necesario para determinar *a priori* las limitaciones que presentaría cualquier esquema de control/observación que se pretenda diseñar. Para facilitararlo, parte de este análisis se realiza utilizando un modelo simplificado, que contiene la esencia de la dinámica más importante del reactor. Esta simplificación puede hacerse cuando: (i) exista un lazo de control de volumen

y por lo tanto este permanece constante y (ii) exista un lazo de control de temperatura de camisa que haga que esta dinámica sea mucho mas rápida que la dinámica de la temperatura del reactor. Si esto ocurre, el análisis de la dinámica del reactor puede realizarse sólo considerando las dinámicas de concentración de reactante y temperatura del reactor [30]:

$$\dot{c} = -\rho(c, T) + \theta(c_e - c) := f_c(c, T, \theta, c_e) \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \dot{T} &= \Delta\rho(c, T) - \theta(T - T_e) - \gamma(T - T_j) := f_T(c, T, T_j, \theta, T_e) \\ y_T &= T \end{aligned} \quad (2.14)$$

Este modelo simplificado considera que:

- (i) el volumen del reactor se mantiene constante $\dot{V} = 0$
- (ii) la concentración de reactante se controla mediante la tasa de dilución del reactor $\theta = q_e/V$
- (iii) la temperatura del reactor se controla mediante la temperatura de la camisa de enfriamiento T_j , despreciando la dinámica en la camisa de enfriamiento $\dot{T}_j = 0$
- (iv) la función de transferencia de calor γ es constante, es decir que siempre se puede transferir la misma cantidad de calor hacia el exterior

Para este modelo simplificado los *estados* (x) y las *salidas reguladas* (z) son la concentración de reactante (c) y la temperatura del reactor (T). Las *entradas de control* (u) son la tasa de dilución del reactor (θ) y la temperatura de la camisa de enfriamiento (T_j). La *salida medida* (y) es la temperatura del reactor (T). La *entrada exógena medida* (w) es la temperatura de alimentación del reactor (T_e), y la *entrada exógena no medida* (d) es la concentración de entrada (c_e). El vector de *entradas del sistema* (v) se forma con las *entradas de control* (u) y las *entradas exógenas* (w y d).

En notación compacta el modelo simplificado del reactor (2.12.13) puede escribirse como:

$$\dot{x} = f(x, u, w, d), \quad x(0) = x_0, \quad (2.15)$$

$$y = h(x) = C_y x \quad (2.16)$$

o en función de las *entradas del sistema*:

$$\dot{x} = f(x, v), \quad x(0) = x_0 \quad (2.17)$$

$$y = h(x) = C_y x \quad (2.18)$$

donde:

$$\begin{aligned}
f &= [f_c, f_T]^T \\
x &= [c, T]^T \in X, \quad y = T \in Y \\
z &= x, \quad d = c_e \in D, \quad C = [0 \quad 1] \\
u &= [\theta, T_j]^T \in U, \quad w = T_e \in W \\
v &= [\theta, T_j, T_e, c_e]^T \in V
\end{aligned}$$

Con este modelo simplificado se procede a realizar el análisis de controlabilidad, observabilidad y detectabilidad.

2.2.1 Controlabilidad local

La propiedad de controlabilidad significa que el estado del reactor puede ser transferido desde cualquier estado inicial a cualquier otro estado en un intervalo de tiempo finito. Si el reactor posee esta propiedad entonces se garantiza la existencia de un controlador a nivel local.

El reactor CSTR debe operar alrededor de un punto de equilibrio $\bar{x} = (\bar{c}, \bar{T})^T$ (posiblemente inestable a lazo abierto) donde se logre obtener un producto con cierta concentración de salida (cinética monótona) o la máxima producción del mismo (cinética no monótona), esto significa que en el modelo simplificado (2.13):

$$\begin{aligned}
0 &= -\rho(\bar{c}, \bar{T}) + \bar{\theta}(\bar{c}_e - \bar{c}) \\
0 &= \Delta\rho(\bar{c}, \bar{T}) - \bar{\theta}(\bar{T} - \bar{T}_e) - \gamma(\bar{T} - \bar{T}_j)
\end{aligned} \tag{2.19}$$

donde \bar{c}_e y \bar{T}_e son los valores nominales de la concentración de entrada y la temperatura de entrada. La matriz de controlabilidad \mathcal{C} de la aproximación lineal alrededor del punto de equilibrio deseado (\bar{c}, \bar{T}) se define como:

$$\mathcal{C} = [B, AB]$$

con $A = f_x(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{v}})$, $B = f_u(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{v}})$.

$$\begin{aligned}
A &= \begin{bmatrix} -\rho_c(\bar{c}, \bar{T}) - \bar{\theta} & -\rho_T(\bar{c}, \bar{T})\gamma \\ \Delta\rho_c(\bar{c}, \bar{T}) & \Delta\rho_T(\bar{c}, \bar{T}) - \bar{\theta} - \gamma \end{bmatrix} \\
B &= \begin{bmatrix} \bar{c}_e - \bar{c} \\ \gamma \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

La matriz de controlabilidad es:

$$\mathcal{C} = \begin{bmatrix} \bar{c}_e - \bar{c} & (\bar{c}_e - \bar{c}) [-\rho_c(\bar{c}, \bar{T}) - \bar{\theta}] - \rho_T(\bar{c}, \bar{T})\gamma \\ \gamma & (\bar{c}_e - \bar{c})\Delta\rho_c(\bar{c}, \bar{T}) + [\Delta\rho_T(\bar{c}, \bar{T}) - \bar{\theta} - \gamma]\gamma \end{bmatrix}$$

y ésta matriz cuadrada tiene rango completo si:

$$\det[\mathcal{C}] = (\bar{c}_e - \bar{c}) [(\bar{c}_e - \bar{c})\Delta\rho_c(\bar{c}, \bar{T}) + [\Delta\rho_T(\bar{c}, \bar{T}) - \bar{\theta} - \gamma]\gamma] - \gamma [(\bar{c}_e - \bar{c}) [-\rho_c(\bar{c}, \bar{T}) - \bar{\theta}] - \rho_T(\bar{c}, \bar{T})\gamma]$$

de donde se puede observar que las condiciones para que el determinante sea diferente de cero son:

$$\text{rank}[\mathcal{C}] = 2 \Leftrightarrow \gamma \neq 0, \quad \bar{c}_e \neq \bar{c}$$

de este resultado sigue la siguiente proposición

Proposición 1 *El reactor simplificado (2.13) tiene la propiedad de controlabilidad local si: a) hay reacción química en el reactor b) el reactor es un sistema no adiabático*

Estas condiciones siempre se cumplen ya que: (i) al haber reacción química la concentración de entrada siempre es mayor que la del reactor $c_e > c$ por el material que está reaccionando y (ii) en un reactor CSTR con camisa de enfriamiento existe transferencia de calor hacia el exterior lo que garantiza que la función de dilución de calor, que depende del coeficiente de transporte de calor, sea positiva $\gamma > 0$. Con el modelo simplificado se puede concluir que en principio cualquier reactor exotérmico es localmente controlable alrededor de cualquier punto de equilibrio deseado (\bar{c}, \bar{T}) sin importar el tipo de cinética de reacción.

2.2.2 Análisis de las propiedades de Observabilidad

Básicamente la observabilidad significa poder distinguir la trayectoria interna de un sistema dinámico utilizando las señales de entrada y salida solamente. Para ello, el observador se encarga de estimar de las variables de estado del sistema. Existen diferentes definiciones de observabilidad para sistemas lineales y no lineales, y aquí se consideran algunas de ellas. El análisis de las propiedades de observabilidad es importante para el diseño del esquema de

observación, porque cualquier observador está basado en alguna propiedad de observabilidad y es un paso necesario previo al diseño de un observador para garantizar la existencia y la convergencia del mismo.

Observabilidad local

La observabilidad local aquí considerada esta basada en la linealización del modelo del sistema alrededor de un punto de operación y la determinación de la matriz de observabilidad lineal \mathcal{O} . Dado el caracter local de la linealización del sistema este tipo de observabilidad linealizada sólo se garantiza localmente. Para obtener la matriz de observabilidad lineal se requieren las matrices de estado A y de salida C :

$$\begin{aligned} A &= \frac{\partial f}{\partial x}(\bar{x}, \bar{v}) \\ C &= \frac{\partial h}{\partial x}(\bar{x}, \bar{v}) \end{aligned}$$

donde:

$$\begin{aligned} \bar{v} &= [\bar{\theta}, \bar{T}_j, \bar{T}_e, \bar{c}_e]^T \\ \bar{x} &= [\bar{c}, \bar{T}]^T \end{aligned}$$

Finalmente, la matriz de observabilidad de la aproximación lineal del modelo simplificado (2.13) se forma como:

$$\mathcal{O} = \begin{bmatrix} C \\ CA \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \Delta\rho_c(\bar{c}, \bar{T}) & \Delta\rho_T(\bar{c}, \bar{T}) - \bar{\theta} - \gamma \end{bmatrix}$$

El sistema es localmente observable si la matriz de observabilidad lineal tiene rango completo, y la matriz de observabilidad tiene rango completo si:

$$rank[\mathcal{O}] = 2 \Leftrightarrow \rho_c(\bar{c}, \bar{T}) \neq 0$$

de este resultado surge la siguiente proposición:

Proposición 2 *El reactor simplificado (2.13) tiene la propiedad de observabilidad local si: $\rho(c, T)$ es monótona (isotónica) con respecto a c .*

Observabilidad no lineal instantánea

La observabilidad no lineal instantánea implica que en cada instante de tiempo es posible reconstruir el estado del sistema a través del mapa de observabilidad no lineal $\phi(x, v)$, es decir que el estado inicial puede ser reconstruido utilizando las salidas medidas y las señales de entrada. Si el mapa es invertible para todos los estados entonces el sistema es observable instantáneamente. El mapa de observabilidad no lineal del modelo simplificado es:

$$\phi(x, v) = \begin{bmatrix} h(x) \\ L_f^1 h(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ \dot{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T \\ \Delta\rho(c, T) - \theta(T - T_e) - \gamma(T - T_j) \end{bmatrix}$$

para que el mapa sea invertible se requiere invertir la función de cinética de reacción $\rho(c, T)$ con respecto a c .

De ambos resultados surge la siguiente proposición:

Proposición 3 *El reactor simplificado (2.13) tiene la propiedad de observabilidad no lineal instantánea si: $\rho(c, T)$ es monótona (isotónica) con respecto a c .*

Las condiciones anteriores permiten concluir que la propiedad de observabilidad depende del tipo de cinética de reacción [77],[37]. El reactor con cinética monótona es local e instantáneamente observable. Mientras que el reactor con cinética no monótona no es local ni instantáneamente observable.

Sin embargo, estas condiciones sólo son suficientes, por lo que no permiten concluir acerca de la existencia o inexistencia de un observador de estado. Muestran que en el caso de reactores con cinética no monótona existe pérdida de propiedades de observabilidad y que por ende no es posible utilizar cualquier tipo de observador para la estimación de la concentración. Para concluir sobre la existencia de un observador de estado es necesario el análisis de detectabilidad.

2.2.3 Detectabilidad

Para realizar el análisis de detectabilidad también se utiliza el modelo simplificado. La propiedad de detectabilidad está basada en la noción de indistinguibilidad de trayectorias que a continuación se enuncia [78]:

Definición 1 *Dos trayectorias de estado $x^1(t)$, $x^2(t)$ son indistinguibles si existen: una entrada $v(t)$ y dos estados iniciales indistinguibles x_0^1 y x_0^2 tal que $h[x^1(t; x_0^1, v(t))] = h[x^2(t; x_0^2, v(t))]$, $\forall t \geq 0$.*

Con la definición de indistinguibilidad de estados iniciales y de trayectorias, la definición de detectabilidad es como sigue [35]:

Definición 2 *El sistema (2.17) es detectable si para todas las trayectorias $x^1(t)$, $x^2(t)$ indistinguibles se cumple que $\lim_{t \rightarrow \infty} \{|x^1(t) - x^2(t)|\} = 0$.*

Esto significa que un sistema detectable permite la existencia de trayectorias indistinguibles (que ningún observador puede distinguir), generadas a partir de una entrada $v(t)$, pero estas trayectorias son convergentes. A la entrada $v(t)$ que hace que el sistema sea no observable se le llama *entrada mala*. Si un sistema es detectable entonces se pueden distinguir las trayectorias indistinguibles. A continuación el método propuesto en [78] se utiliza para determinar las trayectorias indistinguibles y su comportamiento dinámico.

Primero se escriben las ecuaciones de dos plantas con las mismas entradas

$$\dot{c}_1 = -\rho(c_1, T_1) + \theta(c_e - c_1) \quad (2.20)$$

$$\dot{T}_1 = \Delta\rho(c_1, T_1) - \theta(T_1 - T_e) - \gamma(T_1 - T_j)$$

$$y_1 = T_1 \quad (2.21)$$

$$\dot{c}_2 = -\rho(c_2, T_2) + \theta(c_e - c_2) \quad (2.22)$$

$$\dot{T}_2 = \Delta\rho(c_2, T_2) - \theta(T_2 - T_e) - \gamma(T_2 - T_j)$$

$$y_2 = T_2 \quad (2.23)$$

se definen los errores de estado y salida entre ambas plantas

$$\varepsilon_c = c_1 - c_2 \implies c_2 = c_1 - \varepsilon_c$$

$$\varepsilon_T = T_1 - T_2 \implies T_2 = T_1 - \varepsilon_T$$

$$\varepsilon_y = y_1 - y_2 \implies \varepsilon_y = T_1 - T_1 + \varepsilon_T = \varepsilon_T$$

las dinámicas de errores de estado son:

$$\begin{aligned}\dot{\varepsilon}_T &= \dot{T}_1 - \dot{T}_2 = \Delta\rho(c_1, T_1) - \theta(T_1 - T_e) - \gamma(T_1 - T_j) - \Delta\rho(c_2, T_2) + \dots \\ &\quad + \theta(T_2 - T_e) + \gamma(T_2 - T_j) \\ \dot{\varepsilon}_T &= \Delta[\rho(c_1, T_1) - \rho(c_1 - \varepsilon_c, T_1 - \varepsilon_T)] - (\theta + \gamma)\varepsilon_T\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{\varepsilon}_c &= \dot{c}_1 - \dot{c}_2 = -\rho(c_1, T_1) + \theta c_e - \theta c_1 + \rho(c_2, T_2) - \theta c_e + \theta c_2 \\ \dot{\varepsilon}_c &= -\theta\varepsilon_c - \rho(c_1, T_1) + \rho(c_1 - \varepsilon_c, T_2)\end{aligned}$$

y considerando que para cualquier trayectoria indistinguible se cumple que

$$\forall t \geq 0 : \rho(c_1, T_1) = \rho(c_2, T_2) = \rho(c_1 - \varepsilon_c, T_2)$$

la dinámica de concentración es

$$\dot{\varepsilon}_c + \theta\varepsilon_c = 0 \tag{2.24}$$

con este resultado se establece la siguiente proposición:

Proposición 4 *El reactor con cinética no monótona (2.13) es detectable si opera en forma continua, es decir si tiene una tasa de dilución positiva $\theta > 0$.*

Una tasa de dilución positiva garantiza que la ecuación (2.24) tiene al origen como punto de equilibrio asintóticamente estable, y por lo tanto las trayectorias indistinguibles convergen entre sí.

El análisis de detectabilidad muestra que:

- (i) el reactor con cinética no monótona es detectable siempre que exista una tasa de dilución positiva $\theta > 0$ y
- (ii) ante una trayectoria indistinguible, la rapidez de convergencia de cualquier observador queda determinada por la tasa de dilución θ (2.24).

Por otro lado, el análisis de detectabilidad impone una restricción de diseño: no es posible diseñar un observador de estado con una rapidez de convergencia arbitraria para cualquier entrada.

2.2.4 Mapa de Estimabilidad de estado con el modelo detallado

El análisis de observabilidad/detectabilidad anterior se realiza utilizando un modelo simplificado del reactor (2.13). Por otro lado, como ya se mencionó, los observadores de sistemas no lineales están basados en una propiedad de observabilidad particular. En esta sección se define y prueba en el modelo detallado la propiedad utilizada para el diseño del esquema de control propuesto basado en el mapa de estimabilidad del sistema. En el entendido de que ya se ha determinado, con el modelo simplificado, la existencia del observador en caso monótono y la restricción fundamental de diseño para el caso no monótono. Para establecer la definición de estimabilidad no lineal utilizada [43] para el diseño del controlador propuesto en este trabajo considérese el siguiente sistema no lineal:

$$\dot{x} = f(x, u(t)), \quad x(t_0) = x_0 \quad (2.25)$$

$$y = h(x)$$

$$\dim(x, y, u) = (n, m, p) \quad (2.26)$$

$$x \in X, u \in U \quad (2.27)$$

donde los mapas f y h son suficientemente diferenciables en un conjunto cerrado y acotado $X \times U$. de tal modo que el par $x(t_0)$ y $u(t)$ determinan en forma única la trayectoria de estado del sistema:

$$x(t) = \theta_x [t, t_0, x_0, u(t), r]$$

y por lo tanto también la trayectoria de salida

$$y(t) = h[x(t)].$$

La propiedad utilizada es denominada propiedad de estimabilidad [43], y se basa en el diseño constructivo de un estimador de estado utilizando las señales medidas (es decir la entradas $u(t)$ y salidas $y(t)$) y sus derivadas temporales para formar el mapa de salidas y sus derivadas

$$\begin{aligned} \psi(t) &= [y_1, \dots, y_1^{\kappa_1-1}, \dots, y_m, \dots, y_m^{\kappa_m-1}]^T \\ \kappa &= \kappa_1 + \dots + \kappa_m = n, \quad \kappa_i > 1 \end{aligned}$$

y el mapa de entradas y sus derivadas

$$\begin{aligned} v(t) &= [u_1, \dots, u_1^{\nu_1-1}, \dots, u_p, \dots, u_p^{\nu_p-1}]^T \\ \nu &= \nu_1 + \dots + \nu_m \geq p, \quad \nu_i > 1 \end{aligned}$$

Tomando derivaciones temporales sucesivas de los mapas de salida h_1, \dots, h_m sustituyendo \dot{x} por la dinámica del sistema se obtiene el siguiente conjunto de κ ecuaciones algebraicas variantes en el tiempo

$$\psi(t) = \phi[x, v(t)] = [h_1, \dots, L_f^{\kappa_1-1} h_1, \dots, h_m, \dots, L_f^{\kappa_m-1} h_m]^T$$

donde ϕ es un mapa no lineal y $L_f^i h_1$ es la i -ésima derivada direccional del campo escalar $h_1(x, t)$ a lo largo del campo vectorial $f(x, t)$. La dimensión del vector de estado es n , el orden de estimación es κ , el orden de estimación de la i -ésima salida es κ_i y a los ν_i se les denomina índices de exo-observabilidad.

Definición 3 La trayectoria $x(t)$ del sistema (2.25) es estado estimable si: (i) existen m índices de estimabilidad $\kappa_1, \dots, \kappa_m$ tales que $\kappa_1 + \dots + \kappa_m = \kappa = n$, $\kappa_i > 1$ y (ii) el mapa ϕ es x -invertible, es decir: $x(t) = \phi^{-1} \{ \phi[x, v(t)], v(t) \}$.

Utilizando esta definición [43] en el reactor (2.1) se puede establecer la siguiente proposición:

Proposición 5 La trayectoria $x(t)$ del reactor (2.1) es estado estimable con el siguiente orden de estimación (eo) :

$$eo(x) = (\kappa_V, \kappa_T, \kappa_j) = (1, 1, 2), \quad \kappa_V + \kappa_T + \kappa_j = 4 = n$$

si f_T es isotónica con respecto a c , es decir las siguientes desigualdades se cumplen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_T}{\partial c} &> 0 \\ \Delta \left[\frac{\partial}{\partial c} \rho(c, T) \right] &> (T - T_j) \left[\frac{\partial}{\partial c} \gamma(c, T, V, T_j) \right] \end{aligned}$$

Utilizando los siguientes mapas de entradas y salidas

$$\begin{aligned} v(t) &= [q_e] \\ \psi(t) &= [y_V, y_j, y_T, \dot{y}_T]^T \end{aligned}$$

el conjunto de cuatro ecuaciones algebraicas variantes en el tiempo

$$y_T = T \quad (2.28)$$

$$y_j = T_j \quad (2.29)$$

$$y_V = V \quad (2.30)$$

$$\dot{y}_T = \Delta\rho(c, T) - q_e(T - T_e)/V - (T - T_j)\gamma(c, T, V, T_j) = f_T \quad (2.31)$$

tiene una solución única para el estado x .

Para los estados (T, T_j, V) la solución es trivial. Para que exista una solución única del estado c supongamos que f_T es isotónica con respecta a c , esto implica que

$$\frac{\partial \Delta\rho(c, y_T) - (y_T - y_j)\gamma(c, y_T, y_V, y_j)}{\partial c} > 0$$

o bien

$$\Delta \left[\frac{\partial}{\partial c} \rho(c, T) \right] - (T - T_j) \left[\frac{\partial}{\partial c} \gamma(c, T, V, T_j) \right] > 0.$$

En todos los reactores exotérmicos con cinética monótona se cumple que $\frac{\partial}{\partial c} \rho(c, T) > 0$ y la función de dilución de calor $\gamma(c, T, V, T_j)$ no cambia en forma considerable con respecto a c ($\frac{\partial}{\partial c} \gamma(c, T, V, T_j) \approx 0$) y/o decrece conforme aumenta la concentración ($\frac{\partial}{\partial c} \gamma(c, T, V, T_j) < 0$)

ambas posibilidades en el comportamiento de la función de dilución de calor implican que

$$\Delta \left[\frac{\partial}{\partial c} \rho(c, T) \right] > (T - T_j) \left[\frac{\partial}{\partial c} \gamma(c, T, V, T_j) \right]$$

◆

Nótese que la condición de estimabilidad de estado del modelo completo (2.1) es más compleja que la condición de observabilidad no lineal instantánea del modelo simplificado (3) y tampoco se cumple en reactores con

cinética no monótona porque al existir una solución de $\rho(c, T)$ bivaluada para c , implica que existen regiones en las que $\frac{\partial}{\partial c}\rho(c, T) < 0$. La condición de estimabilidad muestra que es posible diseñar un estimador de estado impropio (pues requiere de las derivadas de las señales medidas). La utilidad de este estimador es que muestra el desempeño límite que se puede lograr con un estimador de estados y es el primer paso en la construcción de un estimador propio [43], que no requiera las derivadas de las mediciones.

Además, el mapa de estimabilidad del modelo completo muestra que: si se conoce la función de dilución de calor $\gamma(c, T, V, T_j)$ o su valor instantáneo, es posible determinar de (2.31) el valor instantáneo de la cinética de reacción $r(t) = \rho[c(t), T(t)]$. Esta posibilidad será explotada posteriormente para establecer un estimador que logre recuperar el estado y las entradas desconocidas al mismo tiempo.

Análisis de la dinámica de concentración a lazo abierto

Como se ha visto en el estado del arte, los reactores CSTR industriales comúnmente se controlan manipulando el flujo de salida y de refrigerante (q, q_j) con esquemas de control proporcional-integral (PI) descentralizados para la regulación de volumen y temperatura (z_V, z_T) , respectivamente, mientras que normalmente la concentración se deja a lazo abierto ($q_e = \bar{q}_e$) o se regula utilizando un esquema de control supervisorio y modificando ocasional y manualmente el gasto de entrada con mediciones fuera de línea. Analizando la dinámica de concentración a lazo abierto con $q_e = \bar{q}_e$ y $V = \bar{V}$, es decir $\theta = \bar{\theta}$ y $T = \bar{T}$ en la dinámica simplificada de concentración

$$\dot{c} = -\rho(c, \bar{T}) + \bar{\theta}(c_e - c) := f_c(c, \bar{T}, \bar{\theta}, c_e)$$

esta dinámica en estado estacionario es:

$$\begin{aligned} 0 &= -\rho(c, \bar{T}) + \bar{\theta}(c_e - c) \\ \rho(c, \bar{T}) &= -\bar{\theta}c + \bar{\theta}c_e \end{aligned} \tag{2.32}$$

Como ya se ha mostrado, en general la función cinética de reacción $\rho(c, \bar{T})$ puede ser expresada como el producto de una función de concentración $\alpha(c)$ y otra de temperatura $\beta(\bar{T})$. Por lo tanto se tiene:

$$\rho(c, \bar{T}) = \alpha(c)\beta(\bar{T})$$

Sin importar la forma particular de la función $\beta(T)$ (que en el caso de reactores exotérmicos es una función monótonamente creciente, generalmente exponencial) al valorarla en la temperatura nominal \bar{T} resulta un valor constante $\beta(\bar{T}) = \bar{\beta}$, por lo tanto la dinámica isotérmica es:

$$\rho(c, \bar{T}) = \bar{\beta}\alpha(c)$$

y sustituyendo en la dinámica de concentración en estado estacionario

$$\bar{\beta}\alpha(c) = -\bar{\theta}c + \bar{\theta}c_e. \quad (2.33)$$

El lado derecho de (2.33) es la ecuación de una recta con pendiente $-\bar{\theta}$ y ordenada al origen $\bar{\theta}c_e$, mientras que el lado izquierdo muestra el comportamiento de concentración debido a la cinética de reacción particular.

Para realizar el análisis se considera una cinética de reacción no monótona tipo Langmuir-Hinshelwood con término de inhibición $\sigma \geq 0$ (constante de absorción) de la siguiente forma

$$\alpha(c) = \frac{c}{(1 + \sigma c)^2}$$

Nótese que cuando el término de inhibición es cero $\sigma \triangleq 0$, se tiene el caso monótono, es decir

$$\rho(c, \bar{T}) = \bar{\beta}c$$

y cuando el término de inhibición es mayor que cero $\sigma > 0$ se tiene el caso no monótono

$$\rho(c, \bar{T}) = \frac{\bar{\beta}c}{(1 + \sigma c)^2}$$

Sustituyendo en (2.32) la dinámica en estado estacionario se tienen los dos casos:

$$\bar{\beta}c = -\bar{\theta}c + \bar{\theta}c_e \quad (2.34)$$

$$\frac{\bar{\beta}c}{(1 + \sigma c)^2} = -\bar{\theta}c + \bar{\theta}c_e \quad (2.35)$$

Analizando ambos casos dentro del dominio de atracción del sistema se puede concluir lo siguiente: para el caso monótono (2.34), la intersección

de las curvas es única, de tal forma que el único estado estacionario de la dinámica isotérmica siempre es estable. Para el caso no monótono (2.35) ya que es una ecuación cúbica existen tres posibilidades: (i) que sólo exista una solución, lo que implica monoestabilidad de la dinámica isotérmica o (ii) que existan dos soluciones, lo que implica un punto estable y otro inestable y (iii) que existan tres soluciones, lo que implica que la dinámica isotérmica sea biestable. Esta característica se evaluará en los reactores de prueba ante condiciones nominales para determinar la mono o biestabilidad del reactor con lazo abierto de concentración.

2.2.5 Resumen

Se realiza el análisis de controlabilidad de la aproximación lineal del reactor alrededor del punto de operación, mostrando que la propiedad se cumple tanto en el caso monótono como en el no monótono. El análisis de observabilidad de los modelos simplificado y completo del reactor permite concluir que: (i) el reactor es localmente controlable, (ii) el reactor con cinética monótona es local e instantáneamente observable, por lo que cualquier observador no lineal bien diseñado puede ser acoplado con un controlador por retroalimentación de estado SF, (iii) el reactor con cinética no monótona es detectable (globalmente observable), por lo que es posible diseñar un observador de concentración, (iv) la velocidad de convergencia de este observador no puede ser arbitrariamente rápida para cada entrada, pues en los casos límite una entrada mala generaría una convergencia determinada por la tasa de dilución y (v) el análisis del mapa de estimabilidad del sistema completo muestra que, a diferencia del reactor no monótono, el reactor con cinética monótona es estado estimable y que es posible extrapolar esta propiedad para estimar también las entradas desconocidas del modelo. Por último, el análisis de la dinámica de concentración a lazo abierto del modelo simplificado permite concluir que en el caso monótono esta dinámica es monoestable mientras que en el caso no monótono puede ser mono o biestable.

Capítulo 3

Diseño del controlador no lineal de estado del reactor CSTR

Como se vió en el primer capítulo el reactor CSTR es localmente controlable, por lo que si se conocen las entradas exógenas, los parámetros y las funcionalidades del modelo en principio se puede diseñar un control por retroalimentación de estados, que regule (al menos en forma local) al reactor en el valor de salidas reguladas deseado. En este capítulo se diseña un esquema de control por realimentación de estados de manera constructiva. Primero se resuelve el problema utilizando un control geométrico que sirve para determinar analíticamente las condiciones de solubilidad, las cuales también se interpretan dándoles significado físico. Este controlador no es pasivo, por lo que se aplica la técnica de “backstepping” para lograr que el esquema de control sea pasivo y con ello aumentar su robustez.

3.1 Control Geométrico.

En esta sección se analizan las propiedades geométricas del sistema, es decir aquellas que no cambian al efectuar un cambio de coordenadas [48]. El interés se centra en las propiedades geométricas de las entradas de control con respecto a las salidas reguladas que se mantienen invariantes ante un esquema de realimentación. Considerando que se pueden medir todos los estados (c, T, T_j, V) y que el modelo matemático del reactor es perfecto, se diseña un control geométrico basado en la dinámica inversa de la planta. El

diseño ayuda a determinar las condiciones básicas de solubilidad del problema de control y adicionalmente se da una interpretación física de las mismas.

El reactor cuenta con tres entradas de control (q_e, q, q_j) y tres salidas reguladas (z_c, z_V, z_T) . La elección natural y utilizada en la práctica industrial de las entradas-salidas asociadas para controlar al reactor de forma no-interactiva es la siguiente: (q_e, z_c) , (q_j, z_T) y (q, z_V) . A continuación se calcula el grado relativo vectorial del sistema (2.1) utilizando la función de salidas reguladas $h_z(x)$, se tiene:

$$h_z(x) = \begin{bmatrix} h_{z1}(x) \\ h_{z2}(x) \\ h_{z3}(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c \\ T \\ V \end{bmatrix}$$

para la primera pareja (q_e, z_c)

$$\begin{aligned} h_{z1}(x) &= c \\ L_f^1 h_{z1}(x) &= \dot{c} = -\rho(c, T) + \frac{q_e}{V}(c_e - c) \end{aligned}$$

para la segunda pareja (q_j, z_T)

$$\begin{aligned} h_{z2}(x) &= T \\ L_f^1 h_{z2}(x) &= \dot{T} = \Delta\rho(c, T) + \frac{q_e}{V}(T_e - T) - \gamma(x)(T - T_j) \\ L_f^2 h_{z2}(x) &= \ddot{T} = \Delta \left[\rho_c \dot{c} + \rho_T \dot{T} \right] - \frac{q_e}{V} (\dot{T}_e - \dot{T}) + \frac{\dot{q}_e V + \dot{V} q_e}{V^2} (T_e - T) \\ &\quad - \gamma(x) [\Delta\rho(c, T) + \frac{q_e}{V}(T_e - T) - (1 + \varpi V) \gamma(x)(T - T_j) \\ &\quad + \varpi_j q_j (T_j - T_{je})] - \left[\gamma_c \dot{c} + \gamma_T \dot{T} + \gamma_{T_j} \dot{T}_j + \gamma_V \dot{V} \right] (T - T_j) \end{aligned}$$

y para la tercera pareja (q, z_V)

$$\begin{aligned} h_{z3}(x) &= V \\ L_f^1 h_{z3}(x) &= \dot{V} = -\pi(c, T, V) + q_e - q \end{aligned}$$

La pareja de entrada-salida formada por el flujo de refrigerante y la temperatura $q_j - z_T$ tiene un grado relativo (GR) igual a 2, es decir, la temperatura del reactor es afectada por el flujo de refrigerante a través de dos capacitancias: las dinámicas de T y T_j .

Esto significa que el control asociado (q_j), que se puede despejar de $L_f^2 h_{z2}(x)$, requiere la derivada del flujo de entrada de control (\dot{q}_e), y en consecuencia, el reactor (2.1) con 3-entradas (u) y 3-salidas (z) no tiene grado relativo vectorial. No tener grado relativo vectorial significa que el problema MIMO de control geométrico no puede resolverse con componentes estáticos.

Sin embargo, al aplicar el procedimiento de extensión dinámica se puede obtener un control geométrico dinámico [48]. La aplicación del procedimiento de extensión dinámica da como resultado una nueva entrada de control: $\dot{q}_e = u_{q_e}^a$ y un nuevo estado q_e . Los nuevos vectores de estado (estado aumentado \mathbf{x}_a) y entrada (entrada de control aumentada u_a) son respectivamente:

$$\begin{aligned} x_a &= [c \quad T \quad T_j \quad V \quad q_e]^T = [\mathbf{x}^T, q_e]^T \\ u_a &= [q \quad q_j \quad u_{q_e}^a]^T \end{aligned}$$

y el sistema aumentado puede escribirse como:

$$\dot{x}_a = f_a(x_a, u_a, w, d), \quad x_a(0) = x_{a0}, \quad y = C_{ya}x_a, \quad z = C_{za}x_a \quad (3.1)$$

dónde

$$\begin{aligned} f_a &= [f^T, u_{q_e}^a]^T \\ C_{ya}x_a &= Cx, \quad C_{za}x_a = C_zx \end{aligned}$$

La nueva entrada \dot{q}_e puede despejarse de

$$L_f^2 h_{z1}(x) = \dot{c} = - \left[\rho_c \dot{c} + \rho_T \dot{T} \right] + \frac{\dot{q}_e V + \dot{V} q_e}{V^2} (c_e - c) + \frac{q_e}{V} (\dot{c}_e - \dot{c})$$

La siguiente proposición surge al aplicar el procedimiento de extensión dinámica:

Proposición 6 *El reactor aumentado tiene vector de grado relativo $rd(u_a, z)$*

$$rd(u_a, z) = (q, z_V), (u_{q_e}^a, z_c), (q_j, z_T) = [1, 2, 2] = 5$$

si y sólo si, en un conjunto compacto alrededor de \bar{x}

$$c \neq c_e \quad (3.2)$$

$$T_j \neq T_{j_e} \quad (3.3)$$

$$f_T : T_j - \text{monótona} \blacklozenge \quad (3.4)$$

Estas restricciones analíticas imponen las condiciones físicas que se deben considerar al diseñar cualquier reactor CSTR para que pueda ser satisfactoriamente controlado. En general un reactor CSTR exotérmico bien diseñado cumple que:

(i) al haber reacción química la concentración de reactante es menor que la concentración de alimentación ($c < c_e$) (3.2)

(ii) para comenzar la reacción química puede ser necesaria la inyección de calor hacia el reactor ($T_{je} > T_j$)

(iii) una vez iniciada la reacción química el calor fluye del reactor a la camisa de enfriamiento y de ahí hacia el medio ambiente ($T_j > T_{je}$), por lo que (ii) y (iii) implican (3.3)

(iv) la función de dilución de calor $\gamma(c, T, T_j, V)$ es inversamente proporcional a la temperatura de camisa T_j , esto implica (3.4) puesto que $\frac{\partial \gamma}{\partial T_j} < 0$.

Para probar la Proposición 6 se utilizan argumentos de control geométrico. El reactor aumentado (3.1) forma el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\begin{aligned}
z_V &= V & (3.5) \\
\dot{z}_V &= -\pi(c, T, V) + q_e - q \\
z_c &= c \\
\dot{z}_c &= -\rho(c, T) + \frac{q_e}{V}(c_e - c) \\
\ddot{z}_c &= -\rho_c f_c - \rho_T f_T + \frac{q_e}{V}(\dot{c}_e - f_c) + \frac{(Vu_{q_e}^a - q_e f_V)}{V^2}(c_e - c) \\
z_T &= T \\
\dot{z}_T &= \Delta\rho(c, T) - \frac{q_e}{V}(T - T_e) - \gamma(x)(T - T_j) \\
\ddot{z}_T &= \Delta(\rho_c f_c + \rho_T f_T) - \frac{q_e}{V}(\dot{T}_e - f_T) - \frac{(Vu_{q_e}^a - q_e f_V)}{V^2}(T - T_e) + \\
&\quad -\gamma f_T - (T - T_j)(\gamma_c f_c + \gamma_T f_T + \gamma_V f_V) + \\
&\quad \left[\gamma - (T - T_j)\gamma_{T_j} \right] [\varpi V(T - T_j) - \varpi_j q_j(T_j - T_{je})]
\end{aligned}$$

este conjunto de 8 ecuaciones tiene solución única para el vector desconocido

$$[V, c, T, q_e, T_j, q, u_{q_e}^a, q_j]^T$$

dada por:

$$V = z_V \quad (3.6)$$

$$c = z_c \quad (3.7)$$

$$T = z_T \quad (3.8)$$

$$q_e = \frac{z_V(\dot{z}_c + \rho(z_c, z_T))}{(c_e - z_c)} \quad (3.9)$$

$$T_j = f_T^{-1}(z_c, z_T, \dot{z}_T, z_V, q_e, T_e) \quad (3.10)$$

$$q = q_e - \dot{z}_v - \pi(z_c, z_T, z_V) \quad (3.11)$$

$$u_{q_e}^a = \left[\frac{f_V}{V} + \frac{f_c - \dot{c}_e}{(c_e - c)} \right] q_e + [\ddot{z}_c + \rho_c f_c + \rho_T f_T] \frac{V}{(c_e - c)} \quad (3.12)$$

$$q_j = \frac{\varpi V(T - T_j)}{\varpi_j(T_j - T_{je})} + \frac{\Delta(\rho_c f_c + \rho_T f_T) - \frac{q_e}{V}(\dot{T}_e - f_T) - \frac{(V u_{q_e}^a - q_e f_V)}{V^2}(T - f_V)}{[\varpi_j(T_j - T_{je})] [\gamma - (T - T_j)\gamma_{T_j}]} + \frac{-\ddot{z}_T - \gamma f_T + (T - T_j)(\gamma_c f_c + \gamma_T f_T + \gamma_V f_V)}{[\varpi_j(T_j - T_{je})] [\gamma - (T - T_j)\gamma_{T_j}]} \quad (3.13)$$

La condición (3.2) se necesita para la solución del control q_e (3.9), la condición (3.3) se requiere para solucionar (3.13), y la condición (3.4) es necesaria para resolver (3.10). \blacklozenge

Nótese que la condición (3.2) también fue requerida para la controlabilidad del reactor. Y por otro lado, la dinámica cero (zero dynamics ZD) del sistema aumentado (3.1) está dada trivialmente por $x = \bar{x}$, y por lo tanto es estable en forma robusta.

Para determinar la ley de control geométrico se escribe la siguiente dinámica de regulación de salida lineal, no interactiva y de polo asignable (LNPA “Linear Non-interactive Pole Assignable”) de dimensión 5 (en concordancia con el grado relativo) en cada una de las salidas reguladas

$$\dot{e}_V + k_{V1}e_V = 0 \quad (3.14)$$

$$\ddot{e}_c + k_{c2}\dot{e}_c + k_{c1}e_c = 0 \quad (3.15)$$

$$\ddot{e}_T + k_{T2}\dot{e}_T + k_{T1}e_T = 0 \quad (3.16)$$

donde e_V, e_c y e_T son los errores de regulación

$$\begin{aligned}
e_V &= V - \bar{V} \\
e_c &= c - \bar{c} \\
e_T &= T - \bar{T}
\end{aligned}$$

Corollary 1 *El enforzamiento de la dinámica LNPA en lazo cerrado (3.14) en el reactor aumentado (3.1) da como resultado el control geométrico FF-SF*

$$q = \mu_q^g(V, c, T, q_e) \quad (3.17)$$

$$\dot{q}_e = \mu_{q_e}^g(V, c, T, T_j, q, q_e, T_e, c_e, \dot{c}_e) \quad (3.18)$$

$$q_j = \mu_{q_j}^g(V, c, T, T_j, q, q_e, \mu_{q_e}^g, T_e, T_{j_e}, \dot{T}_e, c_e, \dot{c}_e) \quad (3.19)$$

donde:

$$\begin{aligned}
\mu_q^g &= q_e - k_V(V - \bar{V}) - \pi(c, T, V) \\
\mu_{q_e}^g &= \left[\frac{f_V}{V} + \frac{f_c - \dot{c}_e}{(c_e - c)} \right] q_e + [(\rho_c + k_{c2})f_c - k_{c1}(c - \bar{c}) + \rho_T f_T] \frac{V}{(c_e - c)} \\
\mu_{q_j}^g &= \frac{\varpi V(T - T_j)}{\varpi_j(T_j - T_{j_e})} + \frac{k_{T1}(T - \bar{T}) + (\Delta\rho_T + k_{T2})f_T + \Delta\rho_c f_c + \frac{q_e}{V}(f_T - \dot{T}_e)}{[\varpi_j(T_j - T_{j_e})] [\gamma - (T - T_j)\gamma_{T_j}]} + \\
&\quad - \frac{(Vu_{q_e}^g - q_e f_V)}{V^2}(T - T_e) - \gamma f_T + (T - T_j)(\gamma_c f_c + \gamma_T f_T + \gamma_V f_V)}{[\varpi_j(T_j - T_{j_e})] [\gamma - (T - T_j)\gamma_{T_j}]}
\end{aligned}$$

Al sustituir la dinámica LNPA (3.14) en el reactor (3.1) da como resultado:

$$\begin{aligned}
\dot{z}_V &= -k_V(V - \bar{V}) \\
\ddot{z}_c &= -k_{c1}(c - \bar{c}) - k_{c2}(\dot{c} - \dot{\bar{c}}) \\
\ddot{z}_T &= -k_{T1}(T - \bar{T}) - k_{T2}(\dot{T} - \dot{\bar{T}})
\end{aligned}$$

sustituyendo $(\dot{z}_V, \ddot{z}_c$ y $\ddot{z}_T)$ de la ecuación (3.5) en la ecuación anterior y resolviendo en forma única (garantizado por el grado relativo) para cada entrada de control $(q, q_j, u_{q_e}^g)$ se obtiene el control (3.17)-(3.19) ♦

La estabilidad entrada-estado del sistema a lazo cerrado es consecuencia de la estabilidad entrada-estado de la dinámica LNPA (3.14) forzada.

Nótese que este controlador:

- (i) tiene un componente dinámico \dot{q}_e y dos estáticos q, q_j
- (ii) presenta una interconexión en cascada de un componente dinámico a uno estático $q_j = \mu_{q_j}^g(q_e, \dot{q}_e)$,
- (iii) requiere la derivada de las entradas exógenas, temperatura de entrada T_e y concentración de entrada c_e .
- (iv) todos sus componentes dependen de los vectores de estado y entradas $x - u$ y del conocimiento exacto del modelo matemático (2.1), y
- (v) tiene cinco parámetros de sintonización: $k_{V1}, k_{c2}, k_{c1}, k_{T2}, k_{T1}$.

El control geométrico (3.17)-(3.19) diseñado no es óptimo en el sentido de máxima tolerancia ante errores de modelado, pues el orden de la dinámica entre la entrada de control y la salida regulada es mayor a uno. Dicho de otro modo, el control geométrico no tiene una estructura pasiva. Sin embargo nos muestra las condiciones de resolubilidad del problema de control que a su vez imponen las condiciones físicas que deben considerarse al diseñar cualquier reactor CSTR para que pueda ser satisfactoriamente controlado. En sí mismo, constituye el punto de partida del diseño constructivo que se adoptó en este trabajo, y que sirve para diseñar primero los controles por retroalimentación de estados y por último por retroalimentación de salidas. En la siguiente sección el control geométrico es rediseñado para obtener un control pasivo.

3.2 Control Pasivo

En la teoría de control no lineal es bien sabido que los controles óptimos por retroalimentación de estado son inherentemente robustos y pasivos, con respecto a una salida regulada [54]. Sin embargo, la construcción analítica de un control robusto utilizando la vía directa de optimalidad es muy compleja. Comúnmente, el problema se resuelve utilizando un diseño de optimalidad inversa, es decir, diseñando primero el control pasivo y luego verificando para qué función objetivo el control es óptimo [40].

Las características enumeradas en la sección anterior del control geométrico propuesto(3.17)-(3.19) muestran su poca utilidad práctica. Más aún, el control no es pasivo, pues no tiene una estructura de grado relativo menor o igual a uno en los componentes de control de concentración y tempera-

tura. Desde la perspectiva de control constructivo la mayor desventaja de este controlador es la falta de robustez. Para eliminar este inconveniente en esta sección el control se rediseña utilizando la técnica de pasivación por *backstepping* [54], una técnica de optimalidad inversa.

3.2.1 Rediseño del controlador por optimalidad inversa

Para el rediseño del controlador geométrico FF-SF (3.17)-(3.19) se considera que se pueden medir todos los estados del reactor: c, T, T_j, V . La pasivación del sistema consiste en lo siguiente:

La dinámica de temperatura (2.2) se escribe de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} f_T &= f_T^* + \bar{a}_T e_j^* \\ f_T^* &= f_T(x, T_e, q_e) - \bar{a}_T(T_j - T_j^*) \end{aligned}$$

donde:

$$\begin{aligned} e_j^* &= T_j - T_j^* \\ \bar{a}_T &= \left(\frac{\partial f_T}{\partial T_j} \right)_{SS} = \bar{\gamma} \frac{\partial \bar{\gamma}}{\partial T_j} (\bar{T} - \bar{T}_j) > 0 \end{aligned}$$

T_j^* es un control virtual de la temperatura de la camisa, es decir, la salida deseada en un esquema de control en cascada, mientras que \bar{a}_T es la ganancia nominal estática de la función f_T con respecto a T_j , y e_j^* es el error de regulación de temperatura de camisa.

Se propone la siguiente función candidata de Lyapunov E :

$$E = \frac{e_c^2 + e_V^2 + e_T^2 + e_j^{*2}}{2} > 0 \quad (3.20)$$

la disipación de esta función a lo largo de las trayectorias del reactor es:

$$\dot{E} = e_c \dot{f}_c + e_V \dot{f}_V + e_T (\dot{f}_T^* + \dot{\bar{a}}_T e_j^*) + e_j^* (\dot{f}_j - \dot{T}_j^*)$$

se aplica la técnica de “backstepping” moviendo el término $e_T \dot{\bar{a}}_T e_j^*$ del tercer al cuarto miembro de la ecuación

$$\dot{E} = e_c f_c + e_V f_V + e_T f_T^* + e_j^* (\bar{a}_T e_T + f_j - \dot{T}_j^*)$$

y se fuerza la dinámica del reactor a la dinámica deseada

$$\begin{aligned} f_V &= -k_V e_V \\ f_c &= -k_c e_c \\ f_T^* &= -k_T e_T \\ \bar{a}_T e_T + f_j - \dot{T}_j^* &= -k_j e_j^* \end{aligned}$$

para obtener la siguiente función de disipación:

$$\dot{E} = - (k_c e_c^2 + k_V e_V^2 + k_T e_T^2 + k_j e_j^{*2}) < 0 \quad (3.21)$$

La dinámica a lazo cerrado es de dimensión 4:

$$\dot{e}_c = -k_c e_c, \quad (3.22)$$

$$\dot{e}_V = -k_V e_V \quad (3.23)$$

$$\dot{e}_T = -k_T e_T + \bar{a}_T e_j^* \quad (3.24)$$

$$\dot{e}_j^* = -k_j e_j^* - \bar{a}_T e_T \quad (3.25)$$

Aplicando esta dinámica a lazo cerrado al reactor (2.1) se obtiene el *control no lineal pasivo prealimentado y por retroalimentación de estado NLP-FF-SF*:

$$q_e = \mu_{q_e}(c, V, T, c_e) \quad (3.26)$$

$$q = \mu_q(c, V, T, q_e) \quad (3.27)$$

$$T_j^* = \mu_j^*(x, q_e, T_e) \quad (3.28)$$

$$\dot{T}_j^* = \nu_j^*(x, q_e, q, T_{je}, T_e, \dot{T}_e, \dot{q}_e) \quad (3.29)$$

$$q_j = \mu_j(x, T_{je}, T_j^*, \dot{T}_j^*) \quad (3.30)$$

donde

$$q_e = \mu_{q_e} = \frac{V}{c_e - c} [-k_c(c - \bar{c}) + \rho(c, T)] \quad (3.31)$$

$$q = \mu_q = q_e - k_v(V - \bar{V}) - \pi(c, T, V) \quad (3.32)$$

$$T_j^* = \mu_j^* = T_j + \frac{-k_T(T - \bar{T}) - \Delta\rho(c, T) + \frac{q_e}{V}(T - T_e) + \gamma(c, T, V, T_j)(T - T_j)}{\bar{a}_T} \quad (3.33)$$

$$q_j = \mu_j = \frac{k_j(T_j - T_j^*) - \dot{T}_j^* + \varpi V \gamma(c, T, V, T_j)(T - T_j) + \bar{a}_T(T - \bar{T})}{\varpi_j(T_j - T_{je})} \quad (3.34)$$

$$\dot{T}_j^* = \nu_j^* = \frac{\partial \mu_j^*}{\partial x} f + \frac{\partial \mu_j^*}{\partial q_e} \dot{q}_e + \frac{\partial \mu_j^*}{\partial T_e} \dot{T}_e \quad (3.35)$$

ν_j^* se obtiene tomando la derivada temporal de T_j^*

$$\nu_j^* = \frac{d\mu_j^*}{dt} = \nu_j^*(V, c, T, T_j, q, q_e, T_e, T_{je}, \dot{T}_e, c_e, \dot{c}_e) \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \nu_j^* = & \dot{T}_j - \frac{k_T}{\bar{a}_T} \dot{T} - \frac{\Delta}{\bar{a}_T} (\rho_c \dot{c} + \rho_T \dot{T}) + \left(\frac{\dot{q}_e(\dot{T}_e - \dot{T})V - \dot{V}q_e(T_e - T)}{\bar{a}_T V^2} \right) + \dots \\ & + \frac{1}{\bar{a}_T} \left[(\gamma_c \dot{c} + \gamma_T \dot{T} + \gamma_V \dot{V} + \gamma_{T_j} \dot{T}_j) (T - T_j) + \gamma(\dot{T} - \dot{T}_j) \right] \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\dot{q}_e = \frac{\dot{V}(\rho_c \dot{c} + \rho_T \dot{T} - k_c \dot{c}) - (\dot{c}_e - \dot{c})V[\rho(c, T) - k_c(c - \bar{c})]}{(c_e - c)^2} \quad (3.38)$$

y tiene el siguiente vector k_p de ganancias de control

$$k_p = [k_T, k_j, k_V, k_c].$$

En la práctica industrial es bien sabido que la forma más efectiva de controlar un proceso es utilizar una combinación de dos controles: un control por prealimentación (FF “feed-forward”) más un control por retroalimentación (FB “feed-back”) [3]. El controlador anterior (3.31)-(3.35) está formado por estos dos componentes entrelazados: (i) un componente prealimentado (FF) [haciendo $k_p = 0$ en las ecuaciones (3.31)-(3.35)] que realiza la mayor parte del rechazo a perturbaciones equilibrando la masa y energía entregadas al sistema en función de la demanda de la carga (w, d, \bar{z}) y (ii) un componente por retroalimentación de estado (SFB “state feed-back”) [haciendo $k_p \neq 0$

en las ecuaciones (3.31)-(3.35)] que se encarga de las tareas de regulación y estabilidad.

Este control (3.26)-(3.30) tiene una dinámica lineal y desacoplada en concentración c y volumen V , y una dinámica no lineal y acoplada (tipo cascada) de temperatura $T - T_j$, ambas con una disipación cuadrática y desacoplada. El componente primario (maestro) de control de temperatura (3.28),(3.29) se encarga de generar la entrada deseada T_j^* y su derivada \dot{T}_j^* . Estas señales son utilizadas por el componente secundario (esclavo) (3.30) que modifica el flujo de refrigerante q_j para lograr el seguimiento de la temperatura de camisa deseada.

Por otro lado, nótese que al utilizar este control se obtiene una dinámica en cascada en la temperatura por lo que la estructura de grado relativo es:

$$rd(u, z) = (q, z_V), (q_e, z_c), (q_j, T_j), (T_j, z_T) = (1, 1, 1, 1) = 4 \quad (3.39)$$

si y sólo si

$$c \neq c_e \quad (3.40)$$

$$T_j \neq T_{j_e} \quad (3.41)$$

$$f_T : T_j - \text{monótona} \blacklozenge \quad (3.42)$$

Las características de este controlador son:

(i) requiere el modelo detallado del reactor, incluyendo las funciones $\rho(c, T)$, $\gamma(c, T, T_j, V)$, y $\pi(c, T, V)$

(ii) requiere las derivadas parciales de estas funciones para el cálculo de la derivada de la entrada de control virtual \dot{T}_j^* ,

(iii) no tiene dinámica cero,

(iv) tiene grados relativos iguales a uno, y

(v) tiene cuatro parámetros de sintonización: (k_T, k_j, k_V, k_c)

El control NLP-FF-SF (3.26)-(3.30) es considerablemente más simple que el control geométrico FF-SF (3.17)-(3.19) propuesto en la sección anterior, ya que se trata de un control estático con todos sus grados relativos iguales a uno y tiene una dinámica de error de regulación de dimensión 4, en lugar de 5. Presenta, además, una ventaja adicional sobre los esquemas convencionales en cascada: no necesita una separación dinámica entre las ganancias de control primario y secundario. Esto es debido a la compensación forzada por el intercambio del término $e_T \bar{a}_T e_j^*$ en la dinámica de error propuesta,

que se refleja como un mecanismo de disipación mejorado que el utilizado en compensadores convencionales en cascada.

Utilizando argumentos de control constructivo no lineal [40] el control (3.31)-(3.35) es óptimo con respecto a la siguiente función objetivo:

$$J[x(t)] = \int_t^\infty \left[\tilde{x}^T \tilde{x} + \varphi^T(\tilde{x}, \tilde{d}_a, \tilde{u}) R \varphi(\tilde{x}, \tilde{d}_a, \tilde{u}) \right] dt \quad (3.43)$$

$$R = K^{-2} \quad (3.44)$$

donde:

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= [e_c, e_V, e_T, e_j^*]^T \\ \varphi(\tilde{x}, \tilde{d}_a, \tilde{u}) &= [f_c, f_V, f_T - \bar{a}_T e_j^*, f_j + \bar{a}_T e_T - \dot{\tau}^*]^T \\ \tilde{d}_a &= d_a - \bar{d}_a \\ d_a &= [w^T, d]^T \\ \tilde{u} &= u - \bar{u} \\ \tau^* &= T_j^* - \bar{T}_j \\ K &= \text{diag}(k_c, k_V, k_T, k_j) \end{aligned}$$

En esta función objetivo la desviación de estado \tilde{x} es penalizada efectivamente contra la desviación de control \tilde{u} , porque para cada entrada (\tilde{d}_a, \tilde{u}) , la función φ está en correspondencia uno a uno con \tilde{u} . Esta función objetivo $J[x(t)]$ verifica la robustez estructural del control (3.31)-(3.35).

El comportamiento robusto y estable a lazo cerrado de este controlador por retroalimentación de estados constituye el mejor desempeño que se puede esperar en cualquier control por retroalimentación de estados (SF) con estructura pasiva y esta función de costo en particular (3.43). El siguiente paso en el diseño constructivo busca recuperar este comportamiento, a partir de un control por retroalimentación de salidas (OF) que se diseña en el siguiente capítulo. Para ello el modelo matemático del reactor (2.1) se reescribe de tal forma que se logre obtener un modelo más simple que ayude a explotar las propiedades intrínsecas de pasividad y observabilidad del reactor en favor del propio rediseño del controlador.

3.2.2 Resumen

En este capítulo se han diseñado dos controladores no lineales para un reactor exotérmico CSTR de operación continua utilizando el modelo detallado del reactor. El primer control está basado en la teoría de control geométrico y su diseño muestra las condiciones físicas de solubilidad del problema de control. Este controlador (3.17)-(3.19) resulta ser muy complejo y poco robusto, por lo que es rediseñado para aumentar su robustez utilizando el método de optimización inversa. El controlador pasivo FF-SF (3.31)-(3.35) resultante ofrece varias ventajas sobre el control geométrico (3.17)-(3.19) y sirve para establecer el comportamiento a recuperar por cualquier controlador por retroalimentación de salidas.

El análisis y diseño realizado hasta ahora ha sido genérico en el sentido de que es válido para los reactores CSTR con cualquier tipo de tasa de reacción ya que está basado en la propiedad de controlabilidad local que cumplen toda la clase de reactores tipo CSTR bien diseñados. Ambos controladores son ideales en el sentido que consideran el conocimiento exacto del modelo del reactor y la medición de todos los estados y entradas exógenas. Los capítulos siguientes mostrarán los pasos subsecuentes del diseño constructivo utilizado para diseñar un control por retroalimentación de salidas para reactores con cinética monótona y no monótona respectivamente, considerando que no se conoce con exactitud el modelo matemático.

Capítulo 4

Diseño del controlador de salida propuesto para el reactor con cinética monótona

En el primer capítulo se muestra que el reactor CSTR con cinética monótona es local e instantáneamente observable, por lo que en principio se puede diseñar un control por retroalimentación de estados acoplado con un observador de estado, que regule al reactor en el vector de salidas reguladas deseado. En la práctica, además de que no se cuenta con la medición de concentración c , las funcionalidades no lineales del reactor y sus parámetros son poco conocidos, y al menos una entrada exógena, la concentración de entrada c_e , por lo regular tampoco es medida, por lo que el diseño de un esquema robusto de control con aplicabilidad industrial tiene que tomar en cuenta estas limitaciones. En la primer parte de este capítulo se diseña un Filtro Extendido de Kalman de orden reducido acoplado con el control NLP FF-SF para obtener un control FF-OF (3.26-3.30). Este controlador se utiliza para comparar posteriormente su desempeño *versus* el control propuesto. Posteriormente se continúa el diseño constructivo del controlador para reactores con cinética monótona. La idea central consiste en reescribir el modelo matemático del reactor de tal forma que las entradas desconocidas (funcionalidades y entradas exógenas) y la concentración puedan estimarse a partir de las variables medidas explotando las propiedades de pasividad y observabilidad que tiene el sistema.

4.1 Control prealimentado y por retroalimentación de Salida (FF-OF) implementado con un Filtro Extendido de Kalman

Es bien sabido que el Filtro Extendido de Kalman (Extended Kalman Filter EKF) es el observador más utilizado en control no lineal avanzado de reactores y en general de procesos químicos [62] a pesar de que, en general, carece de criterios de convergencia y procedimientos sistemáticos de sintonización. En esta sección se hace la implementación del control NLP FF-SF (3.31-3.35) con un EKF de orden reducido, es decir, sólo considera la dinámica de concentración y temperatura $c - T$, pues no es necesario estimar el resto de los estados. Esta implementación del controlador NLP FF-SF sirve para comparar su desempeño contra el control propuesto.

El filtro extendido de Kalman está basado en una propiedad de observabilidad integral local, pues requiere que el Grammiano de observabilidad sea no singular en un intervalo de tiempo $[t_0, t_1]$. Por lo tanto, si la trayectoria de estado sólo cruza por la región donde se pierde observabilidad instantánea en momentos aislados de tiempo o bien intervalos de tiempo lo suficientemente grandes para lograr la independencia lineal de las funciones del Grammiano de observabilidad es posible que el filtro extendido de Kalman funcione correctamente [77], [80].

El diseño del Filtro Extendido de Kalman esta basado en la optimización de las ganancias de observación en base a las características estocásticas de las perturbaciones y ruidos del sistema, a modo de minimizar la covariancia del error de estimación [80].

La hipótesis fundamental para el diseño del EKF es considerar que el sistema dinámico es afectado con ruido blanco en forma de dos señales aditivas a la dinámica de estado y salida, $w(t)$ y $v(t)$ respectivamente, es decir:

$$\dot{x} = f(x, u) + w(t), \quad x(t_0) = x_0 \quad (4.1)$$

$$y = h(x) + v(t) \quad (4.2)$$

Básicamente se considera que la señal $w(t)$ engloba incertidumbres y perturbaciones del sistema, y que la señal $v(t)$ es el ruido presente en la medición de salida [80]. Se asume, además, que estos ruidos tienen las siguientes características:

- (i) son independientes entre si,
 - (ii) tienen valor promedio cero y
 - (iii) una variancia dada por las matrices R y Q respectivamente.
- Matemáticamente estas características significan que:

$$\begin{aligned}
 E \{v(t) w(t)^T\} &= 0 \\
 E \{w(t)\} &= 0 \\
 E \{v(t)\} &= 0 \\
 E \{w(t) w(t)^T\} &= R \\
 E \{v(t) v(t)^T\} &= Q
 \end{aligned}$$

Donde $E \{\cdot\}$ es el valor esperado de la señal (\cdot) . A partir de la optimización del sistema (4.1) se obtiene el siguiente observador:

$$\dot{\hat{x}} = f(\hat{x}, u) + K(t)(y - h(\hat{x})), \quad \hat{x}(0) = x_0. \quad (4.3)$$

Donde la matriz de ganancia de retroalimentación de salida $K(t)$ se calcula como:

$$K(t) = P(t)h_x(\hat{x})^T R^{-1} \quad (4.4)$$

y la matriz de covariancia del error de estimación $P(t)$ resolviendo la ecuación dinámica de Ricatti

$$\dot{P}(t) = F(\hat{x}, u)P(t) + P(t)F^T(\hat{x}, u) + Q - P(t)H^T(\hat{x})R^{-1}H(\hat{x})P(t) \quad (4.5)$$

$$P(0) = P_0.$$

dónde:

$$\begin{aligned}
F(\hat{x}, u) &= \left[\frac{\partial f(x, u)}{\partial x} \right]_{x=\hat{x}} \\
H(\hat{x}) &= \left[\frac{\partial h(x)}{\partial x} \right]_{x=\hat{x}} \\
P(t) &= \begin{bmatrix} \sigma_{cc} & \sigma_{cT} \\ \sigma_{cT} & \sigma_{TT} \end{bmatrix} \\
Q &= \begin{bmatrix} q_{cc} & q_{cT} \\ q_{cT} & q_{TT} \end{bmatrix} \\
R &= [r_{TT}].
\end{aligned}$$

Q es la matriz simétrica de error de covariancia de la dinámica concentración-temperatura $c - T$ y R es la variancia de error de medición de temperatura. El filtro extendido de Kalman requiere de $n(n + 1)/2$ ecuaciones dinámicas, donde n es el número de estados estimados. De este modo se forma un sistema dinámico con cinco ecuaciones diferenciales, dos de las cuales corresponden a los estados estimados (\hat{c}, \hat{T}) y tres asociadas con los elementos de la matriz de covariancia del error de estimación $\dot{P}(t)$:

$$\begin{aligned}
\dot{\hat{c}} &= f_c(\hat{c}, \hat{T}, y_V, q_e, \bar{c}_e) + \frac{\sigma_{cT}}{r_{cc}} (y_T - \hat{T}), & \hat{c}(0) &= \hat{c}_0 \quad (4.6) \\
\dot{\hat{T}} &= f_T(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j, y_e, q_e) + \frac{\sigma_{TT}}{r_{TT}} (y_T - \hat{T}), & \hat{T}(0) &= y_{T_0} \\
\dot{\sigma}_{cc} &= 2 \left[\frac{\partial f_1}{\partial c} \sigma_{cc} + \frac{\partial f_1}{\partial T} \sigma_{cT} \right] + q_{cc} - \frac{\sigma_{cT}^2}{r_{TT}} \\
\dot{\sigma}_{TT} &= 2 \left[\frac{\partial f_2}{\partial c} \sigma_{cT} + \frac{\partial f_2}{\partial T} \sigma_{TT} \right] + q_{TT} - \frac{\sigma_{TT}^2}{r_{TT}} \\
\dot{\sigma}_{cT} &= \frac{\partial f_2}{\partial c} \sigma_{cc} + \left[\frac{\partial f_1}{\partial c} + \frac{\partial f_2}{\partial T} \right] \sigma_{cT} + \frac{\partial f_1}{\partial T} \sigma_{TT} - \frac{\sigma_{cT} \sigma_{TT}}{r_{TT}}.
\end{aligned}$$

Definiendo las siguientes variables

$$\begin{aligned}
[s_{cc}, s_{cT}, s_{TT}] &= \frac{1}{r_{TT}} [\sigma_{cc}, \sigma_{cT}, \sigma_{TT}] \\
[\theta_{cc}, \theta_{cT}, \theta_{TT}] &= \frac{1}{r_{TT}} [q_{cc}, q_{cT}, q_{TT}] \\
\begin{bmatrix} f_{cc} & f_{cT} \\ f_{cT} & f_{TT} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial c} & \frac{\partial f_1}{\partial T} \\ \frac{\partial f_2}{\partial c} & \frac{\partial f_2}{\partial T} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

el filtro extendido de Kalman (4.6) puede simplificarse y reescribirse como sigue:

$$\dot{\hat{c}} = f_c(\hat{c}, \hat{T}, y_V, q_e, \bar{c}_e) + s_{cT} (y_T - \hat{T}), \quad \hat{c}(0) = \hat{c}_0 \quad (4.7)$$

$$\dot{\hat{T}} = f_T(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j, y_e, q_e) + s_{TT} (y_T - \hat{T}), \quad \hat{T}(0) = y_{T_0} \quad (4.8)$$

$$\dot{s}_{cc} = 2 \left\{ \left[f_{cc}(\hat{c}, \hat{T}, y_V, q_e) \right] s_{cc} + \left[f_{Tc}(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j) \right] s_{cT} \right\} + \theta_{cc} - s_{cT}^2 \quad (4.9)$$

$$\dot{s}_{TT} = 2 \left\{ \left[f_{TT}(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j) \right] s_{TT} + \left[f_{cT}(\hat{c}, \hat{T}) \right] s_{cT} \right\} + \theta_{TT} - s_{cT}^2 \quad (4.10)$$

$$\dot{s}_{cT} = \left[f_{TT}(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j) + f_{Tc}(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j) \right] s_{cT} + f_{cT}(\hat{c}, \hat{T}) s_{cc} \quad (4.11)$$

$$+ f_{Tc}(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j) s_{TT} + \theta_{cT} - s_{cT} s_{TT} \quad (4.12)$$

Aunque en este momento estamos considerando el observador para reactores con cinética monótona, se puede observar, en las ecuaciones dinámicas anteriores, que el filtro extendido de Kalman funciona correctamente en regiones instantáneamente no observables siempre que sólo opere en instantes aislados o intervalos breves de tiempo. Matemáticamente esto se puede ver de las ecuaciones dinámicas del filtro pues, en la región no observable donde $\frac{\partial f_1}{\partial c}$ o f_{cc} y $\frac{\partial f_2}{\partial c}$ o f_{cT} son cero, existen otros términos en las ecuaciones diferenciales que mantienen funcionando al observador.

Para combinar el filtro extendido de Kalman con el control prealimentado y por retroalimentación de estados (3.31-3.35) se requiere utilizar un par de observadores de orden reducido (Apéndice B) para estimar las señales derivadas de la temperatura de entrada \dot{T}_e y gasto de entrada \dot{q}_e a partir de las señales originales (T_e, q_e) con ganancias de estimación ω_{T_e} y ω_{q_e} respectivamente, y que son requeridas por el controlador (3.31-3.35).

$$\dot{\chi}_{T_e} = -\omega_{T_e}\chi_{T_e} - \omega_{T_e}^2 T_e \quad (4.13)$$

$$\hat{v}_{T_e} = \chi_{T_e} + \omega_{T_e} T_e \quad (4.14)$$

$$\dot{\chi}_{q_e} = -\omega_{q_e}\chi_{q_e} - \omega_{q_e}^2 q_e \quad (4.15)$$

$$\hat{v}_{q_e} = \chi_{q_e} + \omega_{q_e} q_e \quad (4.16)$$

La combinación del controlador (3.31)-(3.36) con los observadores (4.7)-(4.12) y (4.13)-(4.16) dan por resultado el *control prealimentado y por retroalimentación de salida (FF-OF) basado en EKF*.

$$\dot{\hat{c}} = f_c(\hat{c}, \hat{T}, y_V, q_e, \bar{c}_e) + s_{cT} (y_T - \hat{T}), \quad \hat{c}(0) = \hat{c}_0 \quad (4.17)$$

$$\dot{\hat{T}} = f_T(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j, y_e, q_e) + s_{TT} (y_T - \hat{T}), \quad \hat{T}(0) = y_{T_0} \quad (4.18)$$

$$\dot{s}_{cc} = 2 \left\{ \left[f_{cc}(\hat{c}, \hat{T}, y_V, q_e) \right] s_{cc} + \left[f_{Tc}(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j) \right] s_{cT} \right\} + \theta_{cc} - s_{cT}^2 \quad (4.19)$$

$$\dot{s}_{TT} = 2 \left\{ \left[f_{TT}(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j) \right] s_{TT} + \left[f_{cT}(\hat{c}, \hat{T}) \right] s_{cT} \right\} + \theta_{TT} - s_{cT}^2 \quad (4.20)$$

$$\dot{s}_{cT} = \left[f_{TT}(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j) + f_{Tc}(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j) \right] s_{cT} + f_{cT}(\hat{c}, \hat{T}) s_{cc} \quad (4.21)$$

$$+ f_{Tc}(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j) s_{TT} + \theta_{cT} - s_{cT} s_{TT} \quad (4.22)$$

$$\dot{\chi}_{T_e} = -\omega_{T_e}\chi_{T_e} - \omega_{T_e}^2 T_e, \quad \hat{v}_{T_e} = \chi_{T_e} + \omega_{T_e} T_e \quad (4.23)$$

$$\dot{\chi}_{q_e} = -\omega_{q_e}\chi_{q_e} - \omega_{q_e}^2 q_e, \quad \hat{v}_{q_e} = \chi_{q_e} + \omega_{q_e} q_e \quad (4.24)$$

$$q_e = y_v(-k_c(\hat{c} - \bar{c})) + \rho(\hat{c}, \hat{T}) / (\bar{c}_e - \hat{c}) \quad (4.25)$$

$$q = -k_v(y_V - \bar{V}) + q_e - \pi(\hat{c}, \hat{T}, y_V) \quad (4.26)$$

$$T_j^* = \frac{-k_T(\hat{T} - \bar{T}) - \Delta\rho(\hat{c}, \hat{T}) - \frac{q_e}{y_V}(T_e - \hat{T}) + \gamma(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j)(\hat{T} - y_j)}{\bar{a}_T} + y_j \quad (4.27)$$

$$\hat{T}_j^* = \nu_j^*(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j, q, q_e, y_e, y_{j_e}, \hat{v}_{T_e}, \hat{v}_{q_e}) \quad (4.28)$$

$$q_j = \frac{-\hat{T}_j^* + k_j(y_j - T_j^*) + \bar{a}_T(\hat{T} - \bar{T}) - \varpi y_V \gamma(\hat{c}, \hat{T}, y_V, y_j)(\hat{T} - y_j)}{\varpi_j (y_j - y_{j_e})} \quad (4.29)$$

Nótese que en (4.28) la función ν_j^* valuada con \hat{v}_{q_e} en lugar de \hat{q}_e elimina la dependencia de c_e, \dot{c}_e , en comparación con el control (3.36).

El control *control prealimentado y por retroalimentación de salida (FF-OF)* basado en EKF:

(i) consiste de siete ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) y cinco algebraicas (EA),

(ii) no requiere la medición de concentración,

(iii) tiene los siguientes nueve parámetros de sintonización: ganancias de control (k_T, k_j, k_v, k_c) , ganancias de estimación $(\omega_{T_e}, \omega_{q_e})$ y ganancias estocásticas $(\theta_{cc}, \theta_{cT}, \theta_{TT})$ del EKF.

(iv) necesita el modelo detallado del reactor (2.1), las funciones $\rho(c, T)$, $\gamma(c, T, T_j, V)$ y $\pi(c, T, V)$, y de las dos primeras funciones f_c y f_T , sus derivadas parciales con respecto a c y T y

(v) utiliza un valor nominal de la concentración de entrada \bar{c}_e .

Cabe destacar que la sintonización de las ganancias estocásticas $(\theta_{cc}, \theta_{cT}, \theta_{TT})$ no es trivial [60] y usualmente consiste en encontrar valores de la matriz de covariancia Q por prueba y error hasta que se obtengan resultados satisfactorios. Por otro lado, la prueba rigurosa de estabilidad a lazo cerrado con este esquema de observación-control (4.17-4.29) es una tarea complicada, poco realizada en estudios previos, y no será tratada en este trabajo ya que la implementación sólo se hizo para fines de comparación, sólo será señalado que las propiedades de observabilidad local, instantánea y global del reactor con cinética monótona (Proposición 3) sugiere que esta implementación es estable a lazo cerrado si las ganancias son adecuadamente seleccionadas. Sin embargo, desde un punto de vista de control convencional (industrial) este controlador es muy complejo y dependiente del modelo matemático, en relación con los controladores industriales estándares, por lo que la aplicabilidad industrial de este controlador es muy limitada.

4.2 Modelo matemático para el diseño del controlador FF-OF

Cuando se habla del modelo matemático de un sistema en particular, para hablar con claridad, debería de referirse a éste siempre como “un modelo matemático del sistema” en el entendido de que pueden existir diferentes modelos del mismo sistema. En general, un modelo matemático siempre trata de encontrar el mejor compromiso entre (i) ser lo mas simple posible y (ii) reflejar con la mayor fidelidad todos los componentes dinámicos y estáticos

del sistema. Esa es la razón por la cual pueden existir diferentes modelos matemáticos de un mismo sistema. En la búsqueda del mejor compromiso se puede considerar que el modelo matemático utilizado para el diseño de un controlador es en un grado de libertad del diseñador [45]. Utilizando esta libertad en favor del diseño del controlador, en este capítulo se rediseña el modelo matemático del reactor. El rediseño busca hacer compatibles las propiedades intrínsecas de pasividad y observabilidad del reactor con el propio diseño del controlador. El propósito es obtener un modelo que refleje, con un aceptable grado de certidumbre, el comportamiento dinámico del sistema y que a la vez sea lo más descentralizado y lineal posible. El modelo resultante se utiliza posteriormente para el diseño entrelazado del esquema de estimación-control.

4.2.1 Observabilidad de estado-entradas desconocidas

En la proposición (5) se establece que el reactor con cinética monótona es *estado estimable*, es decir que en cualquier tiempo el estado x se puede determinar en forma únivoca utilizando sólo las señales de entrada y salida. Esta es la propiedad de observabilidad más fuerte que un sistema pueda tener. De esta propiedad se puede establecer que es posible diseñar un observador que estime arbitrariamente rápido el estado x , y que la rapidez sólo tiene la limitación impuesta por la propagación de los errores de modelado y medición.

A continuación esta propiedad de estimación instantánea [43] de estado se extrapola para estimar los valores instantáneos de las funciones desconocidas del sistema considerando a éstas como entradas desconocidas adicionales del sistema.

Para determinar esta propiedad de observabilidad, se reescribe el modelo del reactor (2.1) de la siguiente forma:

$$\dot{V} = -\iota + q_e - q, \quad y_V = z_V = V \quad (4.30)$$

$$\dot{T} = \Delta r - \frac{q_e}{V} (T - T_e) - \eta (T - T_j), \quad y_T = z_T = T \quad (4.31)$$

$$\dot{T}_j = \varpi V \eta (T - T_j) - \varpi_j q_j (T_j - T_{je}), \quad y_j = T_j \quad (4.32)$$

$$\dot{c} = -r + \frac{q_e}{V} (c_e - c) \quad z_c = c \quad (4.33)$$

$$\iota = \pi(c, T, V) \quad (4.34)$$

$$r = \rho(c, T) \quad (4.35)$$

$$\eta = \gamma(c, T, T_j, V) \quad (4.36)$$

donde ι , r y η son los valores instantáneos de las funciones π , ρ y γ , respectivamente. Para un reactor con cinética monótona la función $r = \rho(c, T)$ tiene solución única para c

Por lo tanto, si se conocen el valor instantáneo de la cinética de reacción r y la propia función $\rho(c, T)$ entonces es posible obtener un estimado de la concentración c (sensor por “software”).

$$c = \sigma(r, T) \quad (4.37)$$

dónde σ es la función inversa de ρ con respecto a c . Para calcular una señal de control no es necesario conocer los valores instantáneos de las funciones π , ρ y γ . Por esta razón, el modelo matemático (para fines de control) se puede escribir tomando en cuenta sólo sus valores instantáneos ι , r y η . Además, si se introduce una medición virtual de concentración y_c , obtenida a partir de la solución de concentración (4.37), el valor instantáneo de la cinética de reacción r y la temperatura medida y_T

$$y_c = \sigma(r, y_T)$$

el modelo matemático del reactor se puede escribir del siguiente modo:

$$\dot{V} = -\iota + q_e - q, \quad y_V = z_V = V \quad (4.38)$$

$$\dot{T} = \Delta r - \frac{q_e}{V} (T - T_e) - \eta (T - T_j), \quad y_T = z_T = T \quad (4.39)$$

$$\dot{T}_j = \varpi V \eta (T - T_j) - \varpi_j q_j (T_j - T_{je}), \quad y_j = T_j \quad (4.40)$$

$$\dot{c} = -r + \frac{q_e}{V} (c_e - c), \quad y_c = z_c = \sigma(r, y_T) = c \quad (4.41)$$

$$d_m : = [\iota, r, \eta, c_e]^T \quad (4.42)$$

este modelo tiene cuatro estados $x = (V, T, T_j, c)$, cuatro entradas desconocidas $d_m = (\iota, r, \eta, c_e)$, tres mediciones (y_V, y_T, y_j) y una medición virtual (sensor por “software”) y_c . Nótese que este modelo (al cual se denomina x, d_m -estimable) requiere la función $\rho(c, T)$ sólo para obtener la medición virtual de concentración (4.37). La siguiente proposición es la extrapolación de la proposición (5) incluyendo en el cálculo del vector de orden de estimación las entradas desconocidas d_m [43]:

Proposición 7 *El modelo del reactor (4.38-4.42) es estado-entrada desconocida estimable [(x, d_m)-estimable] con el siguiente vector de orden de estimación (eo):*

$$oe(x, d_m) = (\kappa_V, \kappa_j, \kappa_T) = (2, 2, 3) = 7$$

si y sólo si:

$$(i) T \neq T_j, \quad (ii) \Delta \neq 0, \quad (iii) V \neq 0, \quad (iv) \frac{V}{q_e} \neq 0, \quad (v) \frac{\partial \rho}{\partial c} > 0. \quad \blacklozenge$$

El orden de estimación propuesto $(\kappa_V, \kappa_j, \kappa_T) = (2, 2, 3)$ da como resultado el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$y_V = V \tag{4.43}$$

$$\dot{y}_V = -\iota + q_e - q \tag{4.44}$$

$$y_j = T_j \tag{4.45}$$

$$\dot{y}_j = \varpi y_V \eta (y_T - T_j) - \varpi_j q_j (y_j - T_{je}) \tag{4.46}$$

$$y_T = T \tag{4.47}$$

$$\dot{y}_T = \Delta r - \frac{q_e}{y_V} (y_T - T_e) - \eta (y_T - y_j) \tag{4.48}$$

$$T = \Delta \rho_T \dot{y}_T + \Delta \rho_c \left[-r + \frac{q_e}{y_V} (c_e - c) \right] - \frac{d \left[\frac{q_e}{y_V} (y_T - T_e) + \eta (y_T - y_j) \right]}{dt} \tag{4.49}$$

De este sistema de ecuaciones y la ecuación auxiliar (4.37) se obtiene:

$$V = y_V \quad (4.50)$$

$$\iota = q_e - q - \dot{y}_V \quad (4.51)$$

$$T_j = y_j \quad (4.52)$$

$$\eta = \frac{\dot{y}_j + \varpi_j q_j (y_j - T_{je})}{\varpi y_V (y_T - y_j)} \quad (4.53)$$

$$T = y_T \quad (4.54)$$

$$r = \frac{\dot{y}_T + \frac{q_e}{y_V} (y_T - T_e) + \frac{\dot{y}_j + \varpi_j q_j (y_j - T_{je})}{\varpi y_V}}{\Delta} \quad (4.55)$$

$$y_c = \sigma(r, y_T) \quad (4.56)$$

$$c_e = \left[\frac{T + \frac{d\left[\frac{q_e}{y_V}(y_T - T_e) + \eta(y_T - y_j)\right]}{dt}}{\Delta \rho_c} - \Delta \rho_T \dot{y}_T + r \right] \frac{y_V}{q_e} + y_c \quad (4.57)$$

Claramente se observa que (4.46) tiene solución única (4.53) si se cumplen condiciones (i) y (iii), (4.48) tiene solución única (4.55) si se cumple condición (ii), (4.56) tiene solución única si se cumple (v) y (4.57) tiene solución única si se cumple (iv).♦

La estimabilidad estado-entradas desconocidas significa que en cualquier tiempo el estado x y las entradas desconocidas d_m se pueden determinar en forma unívoca utilizando sólo las señales de entrada y salida del sistema.

Las condiciones mencionadas siempre se cumplen físicamente en todos los reactores CSTR exotérmicos ya que: existe un flujo de energía del reactor hacia la camisa de enfriamiento ($T > T_j$), la reacción, al ser exotérmica, desprende calor ($\Delta > 0$), y en operación continua el reactor nunca se vacía ($V > 0$).

Este resultado muestra que para reactores con cinética monótona, el estado y las entradas desconocidas (x, d_m) pueden ser estimados arbitrariamente rápido con un estimador adecuadamente sintonizado. La rapidez de estimación sólo está limitada por la propagación de los errores de modelado y medición.

4.2.2 Modelo quasi lineal y descentralizado (QLD)

En esta sección el modelo (x, d_m)-estimable (4.38-4.42) es reescrito a partir de un cambio de coordenadas inspirado en las propiedades de pasividad y

observabilidad, para llevarlo a una forma quasi lineal y descentralizada con el propósito de simplificar aún más el diseño del controlador.

En una forma análoga a la representación de curvas en cálculo [51], se propone el siguiente cambio de coordenadas de d_m a b , es decir: de un vector de entradas desconocidas $d_m = [l, r, \eta, c_e]^T$ a un vector de cargas desconocidas $b = [b_V, b_j, b_T, b_c]^T$ donde cada carga se define como:

$$b_V = q_e - q - \iota + a_V q \quad (4.58)$$

$$b_j = \varpi V \eta (T - T_j) - [\varpi_j (T_j - T_{je}) - a_j] q_j \quad (4.59)$$

$$b_T = \Delta r - \frac{q_e}{V} (T - T_e) - \eta T + (\eta - a_T) T_j \quad (4.60)$$

$$b_c = \frac{q_e}{V} (c_e - c) - a_c q_e - r \quad (4.61)$$

se definen también cuatro funciones no lineales:

$$b_V = \beta_V(c, V, T, q, q_e) \quad (4.62)$$

$$b_j = \beta_j(c, V, T, T_j, q_j, T_{je}) \quad (4.63)$$

$$b_T = \beta_T(c, V, T, T_j, q_e, T_e) \quad (4.64)$$

$$b_c = \beta_c(c, V, T, q_e, c_e) \quad (4.65)$$

$$\beta = [\beta_V, \beta_j, \beta_T, \beta_c]^T \quad (4.66)$$

$$b = \beta(x, u, d_a) \quad (4.67)$$

Nótese que a cada carga desconocida le corresponde una entrada desconocida.

$$b_V \sim \iota$$

$$b_j \sim \eta$$

$$b_T \sim r$$

$$b_c \sim c_e$$

De esta forma, el modelo del reactor (4.38) puede ser escrito como:

$$\dot{V} = -a_V q + b_V, \quad y_V = z_V = V \quad (4.68)$$

$$\dot{T} = a_T T_j + b_T, \quad y_T = z_T = T \quad (4.69)$$

$$\dot{T}_j = -a_j q_j + b_j, \quad y_j = T_j \quad (4.70)$$

$$\dot{c} = a_c q_e + b_c, \quad y_c = z_c = \sigma(r, y_T) = c \quad (4.71)$$

nótese además que el valor instantáneo de las funciones cinética de reacción r y dilución de calor η pueden escribirse en función de las cargas desconocidas b_T y b_j .

$$\eta = \Phi_\eta = \frac{b_j + [\varpi_j (T_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi V (T - T_j)}$$

$$r = \Phi_r = \frac{b_T + \frac{q_e}{V} (T - T_e) + \frac{b_j + [\varpi_j (T_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi V} + a_T T_j}{\Delta}$$

y como

$$r(T, T_j, V, b_T, b_j, q_e, q_j, T_e, T_{je})$$

la dependencia de la función σ es:

$$y_c = \sigma(r, T) = \sigma(T, T_j, V, b_T, b_j, q_e, q_j, T_e, T_{je})$$

Substituyendo el vector de cargas desconocidas b en el modelo (x, d_m) -observable (4.38-4.42) se obtiene el modelo $(x - b)$ -observable, $(b - y)$ pasivo:

$$\dot{V} = -a_V q + b_V, \quad y_V = z_V = V \quad (4.72)$$

$$\dot{T} = a_T y_j + b_T, \quad y_T = z_T = T \quad (4.73)$$

$$\dot{T}_j = -a_j q_j + b_j, \quad y_j = T_j \quad (4.74)$$

$$\dot{c} = a_c q_e + b_c, \quad y_c = \sigma(y_T, y_j, y_V, b_T, b_j, q_e, q_j, T_e, T_{je}) = z_c = c \quad (4.75)$$

donde:

$$a_c \approx \bar{a}_c := \left(\frac{\partial f_c}{\partial q_e} \right)_{SS} = \frac{\bar{c}_e - \bar{c}}{\bar{V}} > 0 \quad (4.76)$$

$$a_T \approx \bar{a}_T := \left(\frac{\partial f_T}{\partial T_j} \right)_{SS} = \bar{\gamma} \frac{\partial \bar{\gamma}}{\partial T_j} (\bar{T} - \bar{T}_j) > 0 \quad (4.77)$$

$$a_j \approx \bar{a}_j := \left(\frac{\partial f_j}{\partial q_j} \right)_{SS} = \bar{\omega}_j (\bar{T}_j - \bar{T}_{je}) > 0 \quad (4.78)$$

$$a_V \approx \bar{a}_V := \left(\frac{\partial f_V}{\partial q} \right)_{SS} = 1 \quad (4.79)$$

\bar{a}_T fue definida anteriormente, \bar{a}_c es la ganancia nominal estática de la función f_c con respecto a q_e , \bar{a}_j es la ganancia nominal estática de la función f_j con respecto a q_j , y \bar{a}_V es la ganancia nominal estática de la función f_V con respecto a q .

Este modelo, al que se denomina modelo QLD (Quasi-Linear Decentralized), tiene: (i) cuatro estados (V, T, T_j, c), (ii) tres entradas de control (q, q_j, q_e), tres salidas reguladas (V, T, c), tres salidas medidas (y_V, y_T, y_j), una salida inferida (y_c), los siguientes órdenes de estimación (eo)

$$eo(x, b) = (\nu_V, \nu_j, \nu_T, \nu_c) = (2, 2, 2, 2) = 8$$

y los siguientes grados relativos (rd)

$$rd(u, z) = (q, z_V), (q_e, z_c), (q_j, T_j), (T_j, z_T) = [1, 1, 1, 1] = 4 \quad (4.80)$$

$$rd(b, y) = (b_V, V), (b_T, T), (b_j, T_j), (b_c, c) = [1, 1, 1, 1] = 4 \quad (4.81)$$

Como se puede observar, el modelo QLD tiene una estructura de grado relativo diferente a la obtenida con el control geométrico Proposición (6), y, por construcción, la misma estructura de grado relativo que el control pasivo (3.39). Además el modelo QLD (4.72-4.75) presenta dos características notables: (i) es considerablemente menos interactuado y dependiente de las funciones desconocidas del modelo, y presenta menos términos no lineales que el modelo original (2.1) y (ii) es un buen modelo para diseñar un control por retroalimentación de salidas ya que las cuatro parejas de carga-control ($b_V - q, b_j - q_j, b_T - T_j, b_c - q_e$) cumplen la condición “matching” [54] ya que existe una pareja por cada dinámica escalar.

Este modelo es utilizado en la siguiente sección para diseñar el control por prealimentación y retroalimentación de estados FF-SF.

4.3 Control prealimentado y por retroalimentación de estado [Feedforward State-Feedback (FF-SF)]

En esta sección se diseña un control FF-SF tal y como se hizo con el control pasivo (3.31-3.35) pero ahora utilizando el modelo QLD rediseñado (4.72-4.75). Este paso de control constructivo es necesario para mostrar la forma del controlador por prealimentación y retroalimentación de salidas FF-OF, que es diseñado en la siguiente sección.

Por el momento, se asume que se conoce perfectamente el vector de error de cargas b (4.58)-(4.61). El diseño consiste en forzar la dinámica de error pasivada

$$\dot{e}_c = -k_c e_c, \quad \dot{e}_V = -k_V e_V, \quad \dot{e}_T = -k_T e_T + a_T e_j^*, \quad \dot{e}_j^* = -k_j e_j^* - a_T e_T \quad (4.82)$$

utilizada para el diseño del control NL-FF-SF (3.22) al modelo QLD rediseñado (4.72-4.75)

$$a_c q_e + b_c = \dot{e}_c = \dot{c} = -k_c e_c \quad (4.83)$$

$$-a_V q + b_V = \dot{e}_V = \dot{V} = -k_V e_V \quad (4.84)$$

$$a_T T_j^* + b_T = \dot{e}_T = \dot{T} = -k_T e_T + a_T e_j^* \quad (4.85)$$

$$-a_j q_j + b_j - \dot{T}_j^* = \dot{e}_j^* = \dot{T}_j - \dot{T}_j^* = -k_j e_j^* - a_T e_T \quad (4.86)$$

dando como resultado:

$$a_c q_e + b_c = -k_c e_c \quad (4.87)$$

$$-a_V q + b_V = -k_V e_V \quad (4.88)$$

$$a_T T_j^* + b_T = -k_T e_T \quad (4.89)$$

$$-a_j q_j + b_j - \dot{T}_j^* = -k_j e_j^* - a_T e_T \quad (4.90)$$

donde: e_c, e_V, e_T, e_j^* son los errores de regulación definidos previamente y T_j^* es la temperatura de camisa deseada (setpoint).

La única solución para q_e, q, q_j y T_j^* genera el *control pasivo QLD FF-SF*

$$q_e = - \left[\frac{k_c (c - \bar{c}) + b_c}{a_c} \right] \quad (4.91)$$

$$q = \frac{k_V (V - \bar{V}) + b_V}{a_V} \quad (4.92)$$

$$T_j^* = - \left[\frac{k_T (T - \bar{T}) + b_T}{a_T} \right] \quad (4.93)$$

$$q_j = \frac{k_j (T_j - T_j^*) + a_T (T - \bar{T}) + b_j - \dot{T}_j^*}{a_j} \quad (4.94)$$

$$\dot{T}_j^* = - \left[\frac{k_T (a_T T_j + b_T) + \dot{b}_T}{a_T} \right] \quad (4.95)$$

La derivada de la temperatura de camisa deseada \dot{T}_j^* (4.95) se calcula derivando la señal de control (4.93)

$$\dot{T}_j^* = - \left(\frac{k_T \dot{e}_T + \dot{b}_T}{a_T} \right)$$

y sustituyendo $\dot{e}_T = \dot{T} = a_T T_j + b_T$ de la ecuación (4.73).

Nótese que si en este control (4.91-4.95) se hace

$$(a_V, a_T, a_j, a_c) = (\bar{a}_V, \bar{a}_T, \bar{a}_j, \bar{a}_c)$$

y se sustituye el vector de cargas desconocidas $b = [b_V, b_j, b_T, b_c]^T$ por su valor en función de las variables originales del modelo detallado (4.58-4.61), se recupera exactamente el control NL FF-SF (3.31-3.35) diseñado con el modelo original (2.1).

En la siguiente sección se utiliza el control (4.91-4.95) y el modelo QLD (4.72-4.75) para diseñar el control prealimentado y por retroalimentación de salida.

4.4 Control prealimentado y por retroalimentación de Salida [Feedforward Output-Feedback (FF-OF)] propuesto

En esta sección el comportamiento del control pasivo por prealimentación y retroalimentación de estados, con modelo exacto, (3.31-3.36) es recuperado utilizando el modelo QLD (4.72-4.75) y el *control pasivo QLD FF-SF* (4.91-4.95). El control por prealimentación y retroalimentación de estado es acoplado con un observador de estado-entradas desconocidas, recordando que el problema de control ha de resolverse sin contar con la medición de concentración c ni la concentración de entrada c_e . Se hace hincapié que el diseño constructivo, busca obtener en el control resultante características de linealidad, descentralización e independencia del modelo, sobre todo en las funciones inciertas del propio modelo: las funciones $\rho(c, T)$, $\gamma(c, T, T_j, V)$ y $\pi(c, T, V)$.

Para el diseño suponemos que las cargas desconocidas b varían de tal forma que se puede encontrar una velocidad de reconstrucción $\approx \omega_a > 0$ tal que

$$|\dot{b}_a| \ll \omega_a |b_a|, \quad a = V, j, T, c \quad (4.96)$$

Se recupera el modelo quasi-lineal dinámico (QLD) (4.72-4.75):

$$\dot{V} = -a_V q + b_V, \quad y_V = V \quad (4.97)$$

$$\dot{T} = a_T T_j + b_T, \quad y_T = T \quad (4.98)$$

$$\dot{T}_j = -a_j q_j + b_j, \quad y_j = T_j \quad (4.99)$$

$$\dot{c} = a_c q_e + b_c, \quad y_c = \sigma(y_T, y_j, y_V, b_T, b_j, q_e, q_j, T_e, T_{je}) = c \quad (4.100)$$

Para lograr el mayor margen de estabilidad y por lo tanto, mayor tolerancia a errores de modelado, se aplica a cada elemento del vector de carga $b = [b_V, b_j, b_T, b_c]^T$ un observador de orden reducido (Apéndice B):

$$\dot{\chi}_V = -\omega_V \chi_V - \omega_V (\omega_V y_V - a_V q) \quad (4.101)$$

$$\dot{\chi}_j = -\omega_j \chi_j - \omega_j (\omega_j y_j - a_j q_j) \quad (4.102)$$

$$\dot{\chi}_T = -\omega_T \chi_T - \omega_T (\omega_T y_T + a_T y_j) \quad (4.103)$$

$$\dot{\chi}_c = -\omega_c \chi_c - \omega_c (\omega_c \hat{y}_c + a_c q_e) \quad (4.104)$$

donde el estimado de cada carga desconocida es:

$$\begin{aligned}\hat{b}_V &= \chi_V + \omega_V y_V \\ \hat{b}_j &= \chi_j + \omega_j y_j \\ \hat{b}_T &= \chi_T + \omega_T y_T \\ \hat{b}_c &= \chi_c + \omega_c \hat{y}_c\end{aligned}$$

Nótese que para el estimado de la carga desconocida \hat{b}_c se utiliza el estimado de la ecuación del sensor por “software” \hat{y}_c obtenida con el valor estimado \hat{r}

$$\begin{aligned}\hat{y}_c &= \sigma(\hat{r}, y_T) = \sigma(y_T, y_j, y_V, \hat{b}_T, \hat{b}_j, q_e, q_j, T_e, T_{je}) \\ \hat{r} &= (T, T_j, V, \hat{b}_T, \hat{b}_j, q_e, q_j, T_e, T_{je})\end{aligned}$$

Retomando el *control QLD FF-SF* (4.91-4.95) y sustituyendo ($b, c = y_c$) por sus valores estimados (\hat{b}, \hat{y}_c) y considerando la suposición (4.96), da como resultado:

$$q_e = - \left[\frac{k_c (\hat{y}_c - \bar{c}) + \hat{b}_c}{a_c} \right] \quad (4.105)$$

$$q = \frac{k_V (y_V - \bar{V}) + \hat{b}_V}{a_V} \quad (4.106)$$

$$T_j^* = - \left[\frac{k_T (y_T - \bar{T}) + \hat{b}_T}{a_T} \right] \quad (4.107)$$

$$q_j = \frac{k_j (y_j - T_j^*) + a_T (y_T - \bar{T}) + \hat{b}_j - \dot{T}_j^*}{a_j} \quad (4.108)$$

$$\dot{T}_j^* = - \left[\frac{k_T (a_T y_j + \hat{b}_T)}{a_T} \right] \quad (4.109)$$

$$\hat{y}_c = \sigma(y_T, y_j, y_V, \hat{b}_T, \hat{b}_j, q_e, q_j, T_e, T_{je}) \quad (4.110)$$

finalmente la combinación de este último control con el observador de orden reducido (4.101-4.104) y el estimado de cada carga desconocida da por resultado el *control QLD FF-OF*

• Control de volumen (4.111)

$$\begin{aligned}\dot{\chi}_V &= -\omega_V \chi_V - \omega_V (\omega_V y_V - a_V q) \\ q &= \frac{k_V (y_V - \bar{V}) + \omega_V y_V + \chi_V}{a_V}\end{aligned}$$

• Control de temperatura (4.112)

$$\begin{aligned}\dot{\chi}_T &= -\omega_T \chi_T - \omega_T (\omega_T y_T - a_T y_j) \\ T_j^* &= - \left[\frac{k_T (y_T - \bar{T}) + \omega_T y_T + \chi_T}{a_T} \right] \\ \dot{\chi}_j &= -\omega_j \chi_j - \omega_j (\omega_j y_j - a_j q_j) \\ q_j &= \frac{k_j (y_j - T_j^*) + \omega_j y_j + a_T (y_T - \bar{T}) - \dot{T}_j^* + \chi_j}{a_j} \\ \dot{T}_j^* &= -k_T y_j - \frac{k_T}{a_T} (\omega_T y_T + \chi_T)\end{aligned}\tag{4.113}$$

• Control de concentración (4.114)

$$\begin{aligned}\dot{\chi}_c &= -\omega_c \chi_c - \omega_c (\omega_c \hat{y}_c + a_c q_e) \\ q_e &= - \left[\frac{k_c (\hat{y}_c - \bar{c}) + \omega_c \hat{y}_c + \chi_c}{a_c} \right] \\ \hat{y}_c &= h(y, \chi_h, u_h, w)\end{aligned}$$

la función h se obtiene definiendo:

$$\begin{aligned}y &= [y_V, y_j, y_T]^T \\ b_h &= [b_j, b_T]^T \\ \hat{b}_h &= [\hat{b}_j, \hat{b}_T]^T \\ u_h &= [q_j, q_e]^T \\ w &= [T_e, T_{je}]^T \\ \chi_h &= [\chi_j, \chi_T]^T\end{aligned}$$

y valuando la función $\sigma(y_j, y_T, b_T, b_j, q_e, q_j, T_e, T_{je}) = \sigma(y, b_h, u_h, w)$ con el valor estimado de b_h , es decir $\hat{b}_h = \chi_h + \Omega_h y$:

$$\begin{aligned} \sigma(y, b_h, u_h, w) & \mid_{b_h = \hat{b}_h} = \sigma(y, \hat{b}_h, u_h, w) \\ \sigma(y, \chi_h + \Omega_h y, u_h, w) & = h(y, \chi_h, u_h, w) \\ \Omega_h & = \text{diag}(\omega_j, \omega_T) \end{aligned}$$

El *control QLD FF-OF* propuesto: (i) consiste en 4 ecuaciones diferenciales ordinarias, una por cada carga desconocida $b = [b_V, b_j, b_T, b_c]^T$ reconstruida y 6 ecuaciones algebraicas, (ii) el componente de concentración es un control por balance de materia manejado por la información generada en el control de temperatura χ_h , necesita una aproximación de la ganancia estática a_c y, aunque en principio, también necesita de la función cinética de reacción ρ para obtener su inversa $\sigma = \rho^{-1}$, en realidad una tendencia de la función ρ basta para el cálculo del término de innovación h , (iii) el componente en cascada de temperatura necesita de las aproximaciones de a_T y a_j , (iv) el componente de volumen necesita de la aproximación de a_V que es unitaria ($a_V == 1$), (v) los componentes de temperatura y volumen son independientes del componente de concentración y (vi) tiene cuatro ganancias de control (k_c, k_V, k_T, k_j) y cuatro de observación ($\omega_c, \omega_V, \omega_T, \omega_j$).

Como un producto secundario el *control QLD FF-OF* propuesto permite obtener estimados en línea de los valores instantáneos de las funciones cinética de reacción r , coeficiente de intercambio de calor η , factor de contracción ι , y el valor de concentración de entrada c_e . Esto se logra a partir de la definición de cargas desconocidas

$$b_T = \Delta r - \frac{q_e}{V} (T - T_e) - \eta T + (\eta - a_T) T_j \quad (4.115)$$

$$b_j = \varpi V \eta (T - T_j) - [\varpi_j (T_j - T_{je}) - a_j] q_j \quad (4.116)$$

$$b_V = q_e - q - \iota + a_V q \quad (4.117)$$

$$b_c = \frac{q_e}{V} (c_e - c) - a_c q_e - r \quad (4.118)$$

se despeja para ι, η, r y c_e respectivamente

$$r = \frac{b_T + \frac{q_e}{V}(T - T_e) - \eta(T_j - T) + a_T T_j}{\Delta} \quad (4.119)$$

$$\eta = \frac{b_j + [\varpi_j(T_j - T_{je}) - a_j]q_j}{\varpi V(T - T_j)} \quad (4.120)$$

$$\iota = q_e - q - b_V + a_V q \quad (4.121)$$

$$c_e = \frac{V}{q_e}(b_c + a_c q_e + r) + c \quad (4.122)$$

se sustituyen las cargas desconocidas con sus estimados:

$$\begin{aligned} b_T &\longrightarrow \hat{b}_T = \chi_T + \omega_T y_T \\ b_j &\longrightarrow \hat{b}_j = \chi_j + \omega_j y_j \\ b_V &\longrightarrow \hat{b}_V = \chi_V + \omega_V y_V \\ b_c &\longrightarrow \hat{b}_c = \chi_c + \omega_c \hat{y}_c \end{aligned}$$

para obtener las señales estimadas \hat{r} , $\hat{\eta}$, $\hat{\iota}$ y \hat{c}_e :

$$\hat{r} = \frac{\chi_T + \omega_T y_T + a_T y_j + \frac{q_e}{y_V}(y_T - T_e) + \frac{\chi_j + \omega_j y_j - a_j q_j + \varpi_j q_j (y_j - T_{je})}{\varpi y_V}}{\Delta} \quad (4.123)$$

$$\hat{\eta} = \frac{-a_j q_j + \chi_j + \omega_j y_j + \varpi_j q_j (y_j - T_{je})}{\varpi y_V (y_T - y_j)} \quad (4.124)$$

$$\hat{\iota} = q_e - q + a_V q - \chi_V - \omega_V y_V \quad (4.125)$$

$$\hat{c}_e = \hat{y}_c + (\chi_c + \omega_c \hat{y}_c + a_c q_e + \hat{r}) \frac{y_V}{q_e} \quad (4.126)$$

Las cuatro señales (4.123-4.126) estimadas pueden calcularse sin interferir en el funcionamiento del control propuesto y se pueden utilizar para monitorear el producto o el propio proceso. Las condiciones necesarias para este proceso de monitoreo son:

$$\begin{aligned} T &\neq T_j \\ q_e &\neq 0 \end{aligned}$$

Estas condiciones se cumplen en todos los reactores CSTR, ya que la temperatura de reactor siempre es mayor que la de la camisa ($T > T_j$) y el reactor opera en forma continua ($q_e > 0$).

4.5 Estabilidad a lazo cerrado y sintonización

En esta sección se establecen las condiciones de estabilidad a lazo cerrado del control *QLD FF-OF* propuesto (4.111)-(4.114) y las guías de sintonización del mismo.

Las definiciones de estabilidad no local utilizadas se establecen a continuación:

Definición 4 *Considere un sistema dinámico no lineal con entrada exógena variante en el tiempo $d_e(t)$:*

$$\dot{e} = f_e(e, d_e), \quad e(0) = e_0, \quad f_e(0, 0) = 0 \quad (4.127)$$

El estado estacionario (SS) $e = 0$ es entrada-estado (IS) exponencialmente estable [52] si existen constantes positivas a, b_d y λ tal que la trayectoria de estado quede acotada como:

$$|e(t)| \leq ae^{-\lambda t} |e_0| + b_d \|d_e(t)\|, \quad \|d_e(t)\| = \sup |d_e(t)| \quad \forall t \geq 0 \quad (4.128)$$

Definición 5 *Si la desigualdad (4.128) se mantiene para desviaciones de estado inicial ($\delta_0 \geq |e_0|$), entrada ($\delta_{d_e} \geq \|d_e(t)\|$) y estado ($\delta_e \geq |e(t)|$) entonces el SS $e = 0$ es prácticamente (P) estable [56].*

Para simplificar el análisis de estabilidad se definen los siguientes vectores de error de regulación a partir de los errores de regulación e_V, e_j^*, e_T y e_c definidos anteriormente :

$$e = [e_V, e_T, e_j^*, e_c]^T \quad (4.129)$$

$$e_y = [e_V, e_T, e_j^*]^T \quad (4.130)$$

y se proponen los siguientes vectores de error de estimación de cargas:

$$\tilde{b} = [\tilde{b}_V, \tilde{b}_T, \tilde{b}_j, \tilde{b}_c]^T = \hat{b} - b \quad (4.131)$$

$$\tilde{b}_y = [\tilde{b}_V, \tilde{b}_T, \tilde{b}_j]^T \quad (4.132)$$

$$\tilde{b}_h = [\tilde{b}_T, \tilde{b}_j]^T \quad (4.133)$$

donde b es el vector de cargas, \hat{b} es el vector de cargas estimadas y \tilde{b} , \tilde{b}_y y \tilde{b}_h son los vectores de error de estimación de cargas.

El reactor (2.1) en la forma (4.72)-(4.75) con el control propuesto en la forma (4.105)-(4.110) tiene la siguiente dinámica a lazo cerrado (Apéndice C):

$$\dot{e}_y = -A_y e_y - \tilde{b}_y \quad (4.134)$$

$$\dot{\tilde{b}}_y = -\Omega_y \tilde{b}_y - \theta_y(e, d_a, u, \dot{d}_a, \dot{u}) \quad (4.135)$$

$$\dot{e}_c = -k_c e_c - \tilde{b}_c - k_c \tilde{h}(e, b_y, b_c, w; \tilde{b}_h, \tilde{b}_c, \tilde{h}) \quad (4.136)$$

$$\dot{\tilde{b}}_c = -\omega_c \tilde{b}_c - \theta_c(e, d_a, u; \dot{d}_a, \dot{u}) + \omega_c \tilde{g}(e, b_y, b_c, w; \dot{b}_h, \dot{b}_c, \dot{w}) \quad (4.137)$$

donde:

$$A_y = \begin{bmatrix} k_V & 0 & 0 \\ 0 & k_T & -a_T \\ 0 & a_T & k_j \end{bmatrix}$$

$$\Omega_y = \begin{bmatrix} \omega_V & 0 & 0 \\ 0 & \omega_T & 0 \\ 0 & 0 & \omega_j \end{bmatrix}$$

las funciones: θ_y , θ_c , \tilde{h} y \tilde{g} están definidas en el Apéndice C. Las cuatro funciones (θ_y , θ_c , \tilde{h} y \tilde{g}) se hacen cero cuando:

$$\begin{aligned} \tilde{h}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) &= 0 \\ \tilde{g}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) &= 0 \\ \theta_c(0, 0, 0, 0, 0) &= 0 \\ \theta_y(0, 0, 0, 0, 0) &= 0 \end{aligned}$$

Para establecer las condiciones de estabilidad se introducen las siguientes definiciones

$$\begin{aligned} k_p &= (k_c, k_V, k_j, k_T) & k_y &= \min(k_V, k_T, k_j) \\ \omega_p &= (\omega_c, \omega_V, \omega_j, \omega_T) & \omega_y &= \min(\omega_V, \omega_j, \omega_T) \end{aligned}$$

y $L(f, x_i)$ que denota la constante de Lipchitz de la función $f(x_1, \dots, x_n)$ con respecto al escalar x_i .

De la aplicación del teorema de pequeñas ganancias [48] en el formato empleado en [31] surge la siguiente proposición:

Proposición 8 *La dinámica en lazo cerrado del reactor (2.1) con el control (4.111-4.114) es prácticamente (P) estable si las ganancias (k_p, ω_p) y el dominio de atracción cumplen las siguientes condiciones*

$$\omega_c > \frac{L(\theta_c, \tilde{b}_c)}{L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) - 1} \quad (4.138)$$

$$L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) < 1 \quad (4.139)$$

$$k_c > \frac{L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c)}{\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c)} \quad (4.140)$$

$$\omega_y > -L(\theta_y, \tilde{b}_y) \quad (4.141)$$

$$k_y > \frac{L(\theta_y, e_y)}{\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y)} \quad (4.142)$$

$$k_y > \frac{L(\theta_y, e_y)}{\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y)} + \dots \quad (4.143)$$

$$\frac{L(\theta_y, e_c) \left[L(\theta_c, \tilde{b}_y) - L(\theta_c, e_y) + \omega_c L(\tilde{g}, e_y) - \omega_c L(\tilde{g}, \tilde{b}_y) \right]}{k_c \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) - (L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c))} \\ - \frac{L(\theta_y, e_c) \left[k_c \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) \left(L(\tilde{h}, e_y) - L(\tilde{h}, \tilde{b}_y) \right) \right]}{k_c \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) - (L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c))}$$

Las primeras tres condiciones (4.138)-(4.140) garantizan la estabilidad de la dinámica de concentración, las condiciones (4.141)-(4.142) garantizan la estabilidad de la dinámica de temperatura-volumen, mientras que la última condición (4.143) garantiza la estabilidad de toda la dinámica a lazo cerrado

del reactor, estableciendo primero la condición de estabilidad de la dinámica de los estados medidos:

$$k_y > \frac{L(\theta_y, e_y)}{\omega_y - L(\theta_y, \tilde{b}_y)}$$

para que dominen el término de desestabilización

$$k_y > \frac{L(\theta_y, e_y)}{\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y)} + \dots$$

$$\frac{L(\theta_y, e_c) \left[L(\theta_c, \tilde{b}_y) - L(\theta_c, e_y) + \omega_c L(\tilde{g}, e_y) - \omega_c L(\tilde{g}, \tilde{b}_y) \right]}{k_c \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) - (L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c))}$$

$$\frac{L(\theta_y, e_c) \left[k_c \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) \left(L(\tilde{h}, e_y) - L(\tilde{h}, \tilde{b}_y) \right) \right]}{k_c \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) - (L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c))}$$

debido a la interconexión de los subsistemas (4.134)-(4.135) con (4.136)-(4.137).

De estas condiciones se desprenden las siguientes guías de sintonización [4]:

1. Fije la ganancia de control de concentración igual a la tasa de dilución nominal (k_θ), las ganancias de control de temperatura y volumen tres veces más rápidas y las ganancias de observación de tres a cinco veces más rápido (n_ω) que las respectivas de regulación.

$$k_c = \frac{\bar{q}}{\bar{V}} := k_\theta$$

$$\omega_c = n_\omega k_\theta$$

$$k_T = k_j = k_V := k = 3k_\theta$$

$$\omega_T = \omega_j = \omega_V := \omega = n_\omega k$$

$$n_\omega = (3 \text{ a } 5)$$

2. Incremente gradualmente la ganancia de cada observador ω hasta obtener un comportamiento oscilatorio y encuentre ese valor límite ω^+ , regrese y fije $\omega = \omega^+ / l$, donde $l \in [2, 3]$.

3. Incremente gradualmente la ganancia de cada controlador k hasta obtener un comportamiento oscilatorio y encuentre ese valor límite k^+ , regrese y fije $k = k^+/l$, donde $l \in [2, 3]$.
4. Incremente k_c y ω_c hasta obtener un comportamiento aceptable en el lazo de concentración.
5. Si es necesario ajuste en forma individual las ganancias de control y estimación para mejorar el desempeño.

4.6 Control QLD FF-OF escrito en términos de elementos PI e I

En esta sección se muestra como el control propuesto QLD FF-OF (4.111-4.114) se puede reescribir utilizando bloques de control Proporcional-Integral (PI) e Integral (I). Esto se hace por dos razones: (i) la búsqueda de aplicabilidad industrial del esquema propuesto y (ii) establecer que el control propuesto es un versión mejorada de los esquemas de control PI comúnmente utilizados en la industria. Para ello se comienza definiendo las siguientes constantes

$$\begin{aligned}\kappa_a &= k_a + \omega_a \\ t_a &= k_a^{-1} + \omega_a^{-1} \\ a &= V, j, T, c\end{aligned}$$

y las variables de desviación

$$\begin{aligned}
\psi_V &= y_V - \bar{y}_V \\
\psi_j &= y_j - \bar{y}_j \\
\psi_T &= y_T - \bar{y}_T \\
\psi_c &= y_c - \bar{y}_c \\
\psi_h &= y_h - \bar{y}_h \\
v_q &= q - \bar{q} \\
v_{q_j} &= q_j - \bar{q}_j \\
v_{q_e} &= q_e - \bar{q}_e \\
v_h &= u_h - \bar{u}_h \\
\tilde{w} &= w - \bar{w}
\end{aligned}$$

y los siguientes elementos de control (Apéndice G)

$$\begin{aligned}
PI_a(\psi_a) &= \kappa_a \left(\psi_a + t_a^{-1} \int_0^t \psi_a dt \right) \\
PI_T^b(\psi_T) &= \frac{a_T}{a_j} \left(\psi_T + \omega_j \int_0^t \psi_T dt \right) \\
PI_T^d(\psi_T) &= \frac{k_T \omega_T}{a_T} \left(\psi_T + k_T \int_0^t \psi_T dt \right) \\
PI_j^d(\psi_j) &= k_T \left(\psi_j + \omega_T \int_0^t \psi_j dt \right) \\
I_j^b(\psi_j - \tau^*) &= \omega_T \int_0^t (\psi_j - \tau^*) dt \\
I_T^h(\psi_T) &= \int_0^t \psi_T dt \\
I_j^d(\tau^*) &= k_T \omega_j \int_0^t \tau^* dt
\end{aligned} \tag{4.144}$$

utilizando los elementos y constantes definidas el *control QLD FF-OF* se puede reescribir de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
&\bullet \text{ Control de volumen} \\
v_q &= PI_V(\psi_V)
\end{aligned} \tag{4.145}$$

• Control de temperatura (4.146)

$$\begin{aligned}
\tau^* &= PI_T(\psi_T) + I_j^b(\psi_j - \tau^*) \\
\dot{\tau}^* &= I_j^d(\psi_j - \tau^*) - PI_T^d(\psi_T) - PI_j^d(\psi_j) \\
\dot{\tilde{\chi}}_j &= \omega_j \left[a_T I_T^h(\psi_T) - \frac{k_j}{\omega_T} I_j^b(\psi_j - \tau^*) - \tau^* \right] \\
v_{q_j} &= PI_j(\psi_j - \tau^*) + PI_T^b(\psi_T) + \frac{\dot{\tau}^*}{a_j} \\
\dot{\tilde{\chi}}_T &= -\omega_T [k_j I_T^h(\psi_T) - a_T I_j^b(\psi_j - \tau^*)]
\end{aligned}$$

• Control de concentración (4.147)

$$\begin{aligned}
v_{q_e} &= PI_c(\hat{\psi}_c) \\
\hat{\psi}_c &= \varphi_c(\tilde{\chi}_h, \psi, v_h, \tilde{w})
\end{aligned}$$

Esta forma de reescribir el control propuesto permite diferenciar fácilmente el esquema convencional y los bloques adicionales propuestos para mejorar el esquema tradicional. El diagrama a bloques del *control QLD FF-OF* propuesto en términos de elementos PI e I se presenta en la Fig. 4.1. Los bloques en color gris constituyen la estructura de control comúnmente utilizada en la práctica industrial de control de reactores, los bloques adicionales, en color blanco, constituyen la mejora propuesta al esquema tradicional.

El esquema convencional consiste en bloques de control descentralizado de volumen PI_V y en cascada de temperatura (PI_T, PI_j) y un control manual del gasto de entrada fijado en su valor nominal \bar{v}_{q_e} y recalibrado con mediciones periódicas de concentración fuera de línea, es decir:

$$\begin{aligned}
v_q &= PI_V(\psi_V) \\
\tau^* &= PI_T(\psi_T) \\
v_{q_j} &= PI_j(\psi_j - \tau^*) \\
v_{q_e} &= \bar{v}_{q_e}
\end{aligned}$$

Los bloques adicionales de control son: (i) derivación del valor deseado de temperatura (I_j^d, PI_T^d, PI_j^d), (ii) término de “backstepping” (I_j^b, PI_T^b) en el

lazo de temperatura, y (iii) controlador PI de concentración (PI_c) alimentado por un bloque de estimación de concentración por “software” φ_c que utiliza la información del lazo de temperatura. Los nuevos bloques de temperatura mejoran el funcionamiento del control convencional en cascada de tres formas diferentes: (i) removiendo la separación dinámica normalmente necesaria entre el bloque primario y el secundario, (ii) aumentando la capacidad de seguimiento de trayectoria del lazo secundario (con el cálculo de la derivada del “setpoint”) y (iii) estableciendo un mecanismo de disipación de calor mas eficiente al existir un intercambio de información entre el lazo primario y el secundario. Por su parte el bloque de estimación de concentración por “software” φ_c permite habilitar un lazo de control de concentración.

Cabe señalar que la síntesis de estos bloques adicionales son resultado de la aplicación del diseño constructivo, y que desde el punto de vista industrial la adición de los mismos no es trivial ni convencional.

También cabe señalar que es preferible implementar el controlador propuesto en la forma QLD FF-OF (4.111)-(4.114) por sobre la forma PI e I (4.145)-(4.147) ya que: (i) esta primera realización tiene *per se* una protección “anti-windup” pues el observador funciona aún en presencia de saturación en la señal de control y (ii) el diseño de una protección “anti-windup” no es una tarea sencilla.

La implementación del control QLD FF-OF propuesto logra una máxima independencia con respecto a las funciones de transporte de calor y contracción volumétrica (γ y π) que generalmente son desconocidas. El controlador propuesto sólo requiere de: (i) valores aproximados de los parámetros estáticos (a_T, a_j y a_V) para los lazos de control de temperatura y volumen que realizan la estabilización del reactor, (ii) el parámetro estático (a_c) para el lazo de regulación de concentración y (iii) para propósitos de estimación, la función de cinética de reacción (ρ) con parámetros aproximados en el lazo de concentración, en el entendido de que no es necesario el conocimiento exacto de la función, pues en una implementación industrial el offset de concentración se puede corregir ajustando los parámetros de la función a partir de mediciones ocasionales efectuadas para monitorear el producto.

Desde una perspectiva de control avanzado el control propuesto es diseñado explotando las propiedades de pasividad y observabilidad del propio reactor. El control propuesto logra recobrar el desempeño de los controladores fuertemente dependientes del modelo matemático NLP FF-SF (3.31)-(3.35) y FF-OF+EKF (4.17)-(4.29) como se ve en la siguiente sección.

4.7 Ejemplo de Aplicación (reactor monótono)

En esta sección se presentan los resultados de simulaciones en lazo cerrado, con condiciones nominales y robustas, en un reactor de prueba con los controles NLP FF-SF (3.31)-(3.35), FF-OF+EKF (4.17)-(4.29) y QLD FF-OF (4.111)-(4.114).

4.7.1 Descripción del reactor de prueba

Considere el reactor (2.1) con las siguientes funciones no lineales de tasa de reacción ρ , tasa de dilución de calor γ y tasa de contracción volumétrica π :

$$\begin{aligned}\rho(c, T) &= ce^{(a_\rho - \frac{b_\rho}{T})} \\ \gamma(c) &= a_\gamma + b_\gamma c + c_\gamma c^2 \\ \pi(V, c, T) &= \varepsilon_p \rho(c, T) V\end{aligned}$$

con los siguientes parámetros

$$\begin{aligned}a_\rho &= 25, & b_\rho &= 10^4, & a_\gamma &= 0.7, & b_\gamma &= 0.8, & c_\gamma &= 0.4, & \varepsilon_p &= 0.15 \\ \Delta &= 200, & \varpi_j &= 1, & \varpi &= 1\end{aligned}$$

entradas de control nominales

$$\bar{q}_e = 1.000, \quad \bar{q} = 0.925, \quad \bar{q}_j = 8.775$$

y entradas exógenas nominales

$$\bar{T}_e = 350, \quad \bar{T}_{je} = 293, \quad \bar{c}_e = 1.$$

Las dependencias de las funciones de tasa de dilución de calor γ y tasa de contracción volumétrica π fueron adoptadas de un reactor de polimerización [31]. Cuando la tasa de dilución de calor se fija en $\gamma = 1$, y se desprecian las dinámicas de volumen y temperatura de la camisa (V, T_j) , el reactor (2.1) se convierte en el bien conocido reactor de Aris-Amundson [21] con dos dimensiones y tres puntos de equilibrio, que ha sido sujeto de innumerables estudios de control.

Tabla 4.1: Puntos de equilibrio del reactor monótono con entradas nominales

puntos de equilibrio	S_E	S_U	S_I
concentración [/]	0.99	0.50	0.02
temperatura [K]	332.11	400.00	474.58
temperatura de camisa [K]	314.75	350.00	374.54
volumen [L]	1.00	1.00	1.00
condición local	estable	inestable	estable

Dada la presencia de la tasa de contracción volumétrica, el reactor eventualmente se puede vaciar $V = 0$, o llenar $V = 1.3\bar{V}$, como se puede apreciar en la figura 4.2

Si se considera por lo pronto un control ideal por balance de materia (MB Material Balance)

$$q = q_e - \varepsilon_p \rho(c, T)V \implies \dot{V} = 0, \quad \bar{V} = 1 \quad (4.148)$$

que mantenga constante el volumen dentro del reactor, entonces se pueden calcular los puntos de equilibrio del reactor con las entradas nominales. Estos puntos se enumeran en la tabla 4.1, dos de ellos son estables, y corresponden al punto de extinción (S_E) e ignición (S_I) de reacción respectivamente y el tercero es un punto inestable (S_U).

La proyección del plano de fase en el plano concentración-temperatura se muestra en la figura 4.3. Las trayectorias que presenta el sistema en la vecindad de los siguientes puntos de equilibrio:

$$x_{0E} = [0.5, 399, 350]^T, \quad x_{0I} = [0.5, 401, 350]^T$$

se muestran en la figura 4.2, donde se observa que las trayectorias del reactor con el control perfecto por balance de materia MB (4.148) tienden a los puntos de equilibrio estables de extinción e ignición, respectivamente.

La tarea de control consiste en regular al reactor en su punto inestable a lazo abierto es decir:

$$\bar{z} = [\bar{c}, \bar{T}, \bar{V}]^T = [0.5, 400, 1]^T$$

4.7.2 Simulación y sintonización

Las pruebas nominales se realizaron con valores exactos de los parámetros del modelo, mediciones sin ruido y entradas exógenas fijadas en su valor nominal. El propósito de estas pruebas es verificar el funcionamiento de los tres controladores con condiciones ideales y contrastar la recuperación del comportamiento de los controles por retroalimentación de salida contra el control por retroalimentación de estado.

Las pruebas robustas se realizan con valores aproximados de los parámetros del modelo matemático, mediciones ruidosas y entradas exógenas variantes con el tiempo. El objetivo de estas pruebas es comparar de forma apropiada los tres controladores con condiciones realistas. En todas las pruebas las condiciones iniciales son cercanas al punto de equilibrio inestable: $x(0) = [0.45, 397, 353, 0.9]^T$

En las pruebas robustas el reactor es forzado a: (i) variaciones senoidales de $2K$ de amplitud y frecuencia cercana a la resonante en las temperaturas de entrada del reactor T_e y de la camisa de enfriamiento T_{j_e}

$$T_e = \bar{T}_e + 2 \sin(4\pi t), \quad T_{j_e} = \bar{T}_{j_e} + 2 \cos(4\pi t) \quad (4.149)$$

(ii) un cambio escalón de la concentración de entrada c_e en $t = 3$ del -10%

$$c_e(t) = 1 - 0.1\mu_{-1}(t - 3) \quad (4.150)$$

y (iii) ruido gaussiano con cierta desviación estandar (sd) a las mediciones de temperatura y volumen

$$y_V = V + w_V, \quad sd(w_V) = 0.1 \quad (4.151)$$

$$y_a = a + w_a, \quad sd(w_a) = 3, \quad a = T, T_j, T_e, T_{j_e} \quad (4.152)$$

Los tres controladores utilizan los siguientes valores aproximados de los parámetros:

$$\bar{a}_\rho = 0.95a_\rho, \quad \hat{b}_\rho = 1.05b_\rho, \quad \hat{\Delta} = 1.05\Delta, \quad \hat{\varepsilon}_p = 1.05\varepsilon_p \quad (4.153)$$

$$\bar{a}_\gamma = 0.95a_\gamma, \quad \hat{b}_\gamma = 1.05b_\gamma, \quad \hat{c}_\gamma = 1.05c_\gamma \quad (4.154)$$

El control QLD FF-OF (4.111)-(4.114) utiliza los siguientes parámetros estáticos aproximados del modelo QLD (5.35)-(5.38)

$$\bar{a}_c = 1.3a_c, \quad \bar{a}_T = 0.8a_T, \quad \bar{a}_j = 1.25a_j, \quad \bar{a}_V = 0.75a_V$$

y las siguientes condiciones iniciales de los observadores

$$\chi_a(0) = -a_a u_a(0) - \omega_a y_a(0), \quad a = c, T, j, V.$$

La aplicación de las guías de sintonización propuestas después de tres iteraciones dan como resultado las siguientes ganancias de control y estimación:

$$(k_c, k_V, k_T, k_j) = (3, 3, 3, 12), \quad (\omega_V, \omega_j, \omega_T, \omega_c) = (30, 30, 30, 20)$$

Nótese que la ganancia del componente secundario de temperatura k_j es sólo cuatro veces más rápida que la del componente primario k_T .

Los controles NLP FF-SF (3.31)-(3.35), FF-OF+EKF (4.17)-(4.29) utilizan el valor nominal de concentración de entrada $\bar{c}_e = 1$, y las mismas ganancias de control que el control propuesto. Las ganancias utilizadas por el EKF se toman de una investigación previa de estimación de reactores [60].

$$q_{cc} = 7.590 \times 10^{-3}, \quad q_{TT} = 6.006 \times 10^{-7}, \quad q_{cT} = 0, \quad r_{TT} = 2.376 \times 10^{-7}$$

y las siguientes condiciones iniciales:

$$\hat{c}(0) = 0.5, \quad \hat{T}(0) = 400, \quad s_{cc}(0) = s_{TT}(0) = s_{cT}(0) = \chi_{T_e}(0) = \chi_{q_e}(0) = 0$$

En las pruebas nominales se utilizan las mismas ganancias de control y estimación y mismas condiciones iniciales que en el caso robusto para poder compararlos equitativamente.

4.7.3 Comportamiento nominal.

La prueba nominal es la más desfavorable para el controlador propuesto (4.111)-(4.114) ya que éste sólo utiliza la información estática del modelo QLD (5.35)-(5.38), mientras que los controles NLP FF-SF (3.31)-(3.35), y FF-OF+EKF (4.17)-(4.29) utilizan la información del modelo dinámico detallado (2.1). En la figura 4.4 se muestra el comportamiento en lazo cerrado

de cada uno de los controladores donde se observa que: (i) los tres controladores estabilizan al reactor en su punto de equilibrio inestable, (ii) el control NLP FF-SF presenta el mejor comportamiento (sobreamortiguado y con señales de control razonablemente lejos de saturación) ya que utiliza la medición de todos los estados y está basado en una propiedad de optimalidad, (iii) como consecuencia de la detectabilidad de estado-observabilidad de entrada el controlador FF-OF+EKF tiene un comportamiento muy similar al control NLP FF-SF y (iv) el control QLD FF-OF, después de un transitorio, recupera el comportamiento del controlador pasivo basado en el modelo exacto NLP FF-SF (3.31)-(3.35).

En la figura 4.5 se presentan los estimados del estado y las entradas desconocidas del control QLD FF-OF, mostrando que en concordancia con la propiedad de observabilidad entrada-estado los estimados convergen a su valor actual cuatro veces más rápido que la dinámica del reactor.

Para verificar que el controlador de temperatura propuesto no requiere separación dinámica entre el componente primario y secundario se simulan tres corridas diferentes con los siguientes juegos de ganancias maestro-esclavo:

$$(k_T, k_j) = (3, 12), (6, 6), (12, 12)$$

En la figura 4.6 se observan los resultados de la simulaciones mostrando que los tres pares de ganancias tienen una respuesta transitoria satisfactoria, corroborando que los componentes adicionales de derivación del “set point” (I_j^d, PI_T^d, PI_j^d) y de “backstepping” (I_j^b, PI_T^b) mejoran el comportamiento de un esquema de control en cascada convencional, al no requerir separación dinámica entre ambos componentes.

4.7.4 Comportamiento Robusto

Las respuestas de la prueba robusta se presentan en la figura 4.7, mostrando que: (i) los tres controladores logran estabilizar a la planta en forma práctica alrededor del punto de equilibrio inestable, (ii) los controladores NLP FF-SF y FF-OF+EKF presentan desempeños muy similares, y (iii) el controlador QLD FF-OF supera a los controles NLP FF-SF y FF-OF+EKF en $t > 3$ (respuesta asintótica), mientras que estos últimos superan al control propuesto en $t < 3$ (respuesta transitoria). De tal modo que el control propuesto tiene mejor comportamiento asintótico que transitorio tal como se refleja en sus señales de control que tienen mayores oscilaciones en la parte transitoria.

También ofrece una regulación sin desviación en el control de temperatura y volumen, y prácticamente ninguna influencia en cambios de la concentración de entrada c_e . Ya que en la práctica industrial el rechazo a perturbaciones sobre periodos largos de tiempo es el principal objetivo de control de procesos continuos, se puede afirmar que el control propuesto supera el desempeño de los otros dos controladores. Por otro lado, la estructura del control propuesto es más simple ya que: (i) está basado en un modelo con mayor cantidad de términos lineales, (ii) es más descentralizado y (iii) es menos dependiente del modelo matemático que las contrapartes.

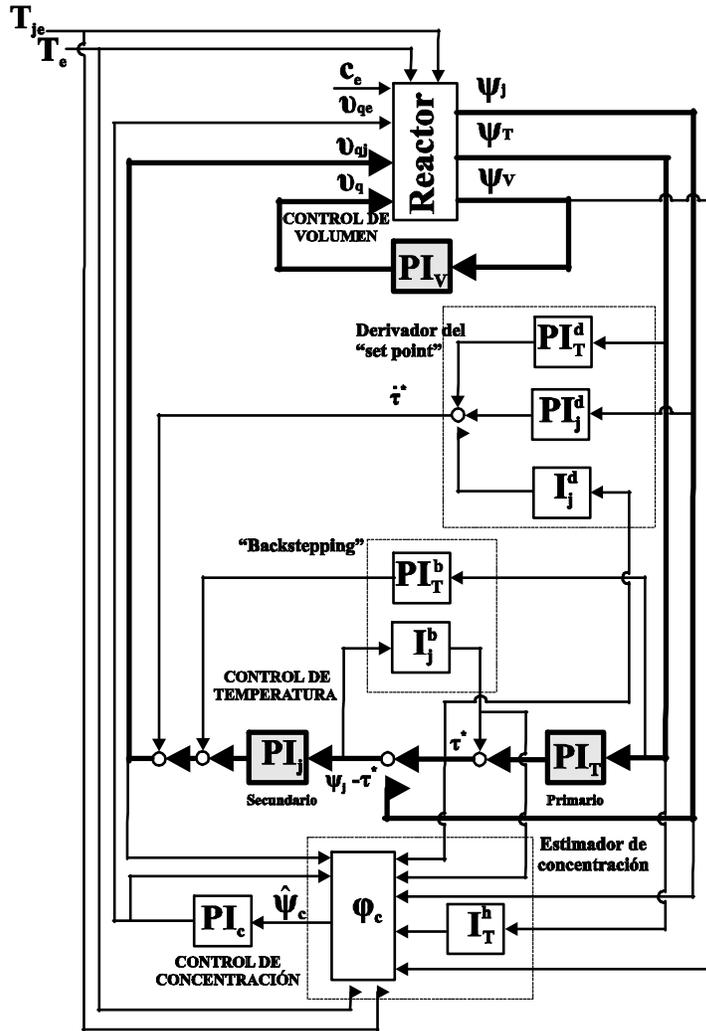


Figura 4.1: Diagrama de bloques del control propuesto con elementos convencionales PI e I

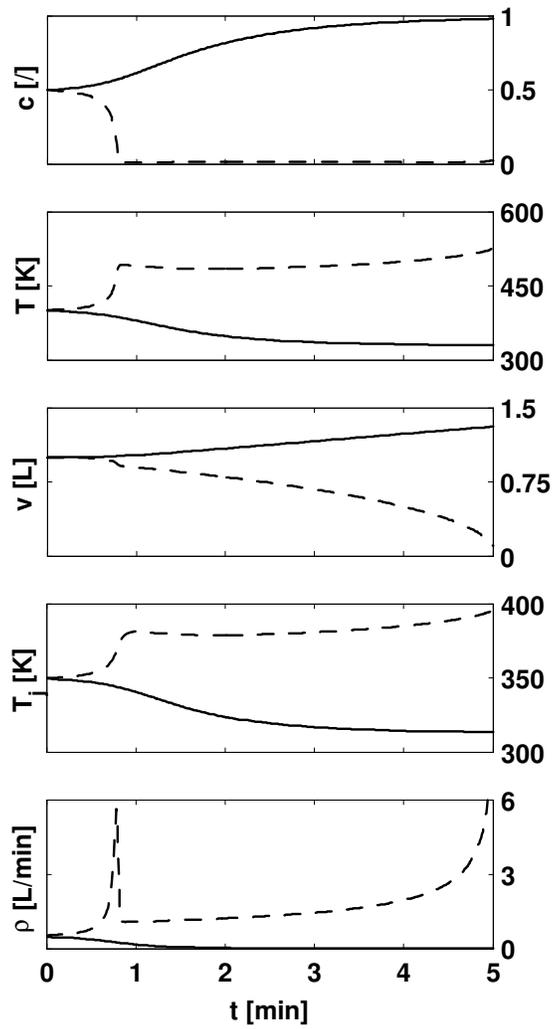


Figura 4.2: Respuesta del reactor con condiciones iniciales $x_{0E}(-)$ y $x_{0I}(- -)$

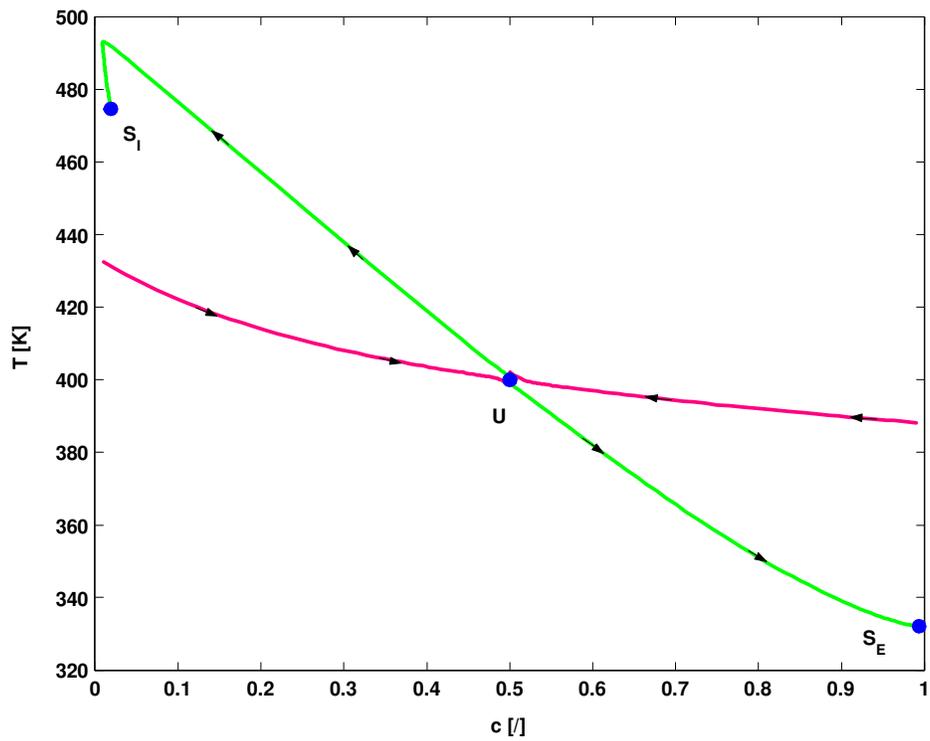


Figura 4.3: Proyección en el plano $c - T$ del plano de fase del reactor con el control MB (4.148).

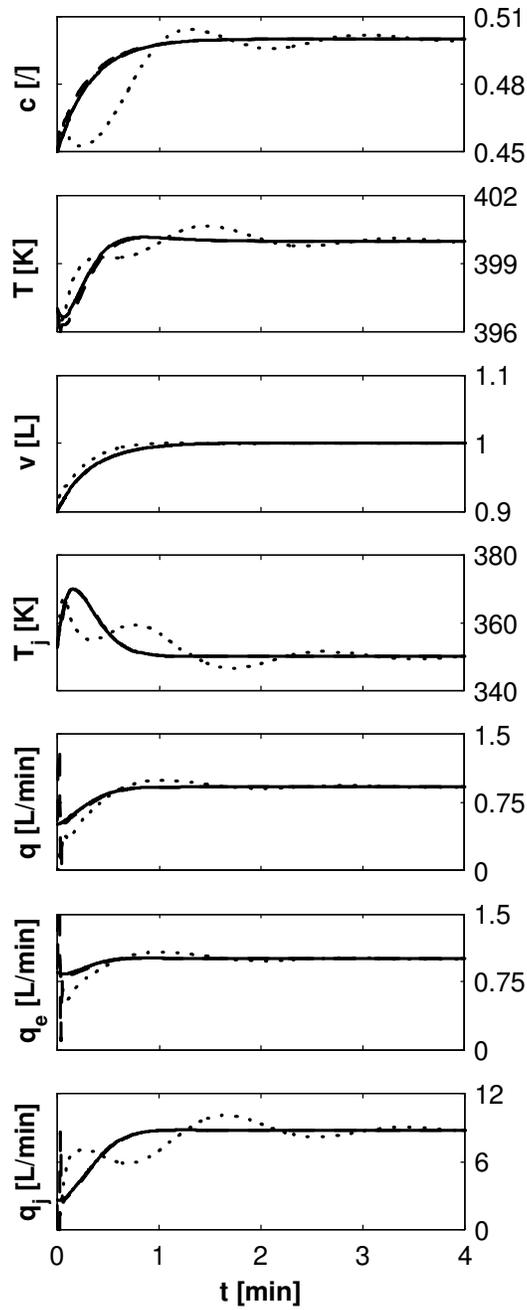


Figura 4.4: Respuesta a lazo cerrado con los controles NLP FF-SF (3.31)-(3.35)(-), FF-OF+FEK (4.17)-(4.17)(--) y QLD FF-OF (4.111)-(4.114)(⋯).

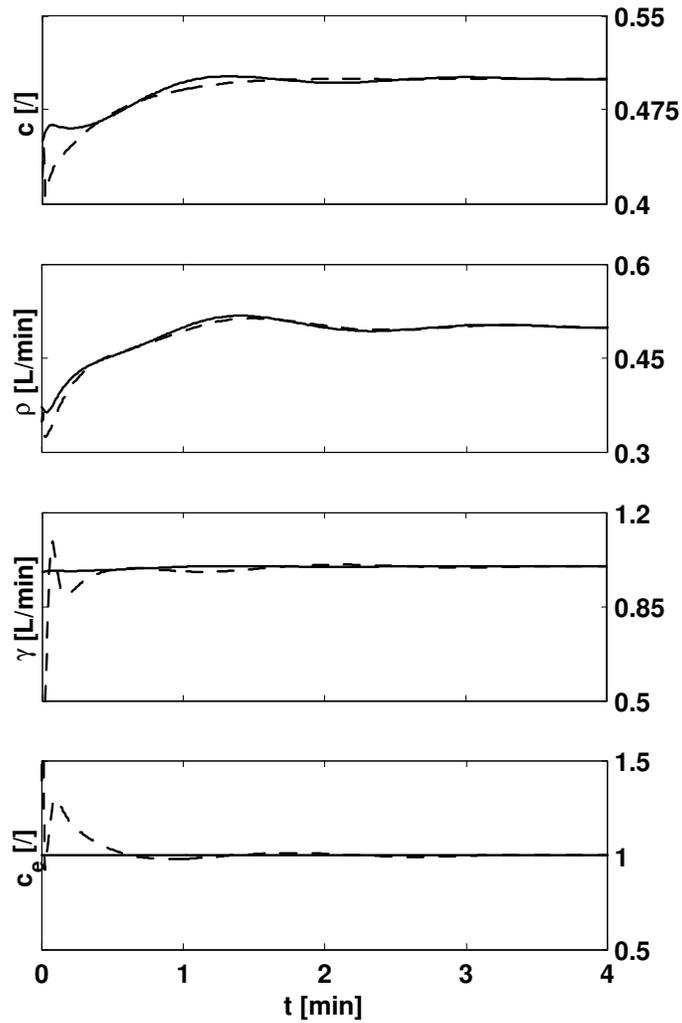


Figura 4.5: Concentración, tasa de reacción, tasa de disipación de calor y concentración de entrada del control QLD FF-OF (4.111)-(4.114), valores actuales (—) y valores estimados (- -).

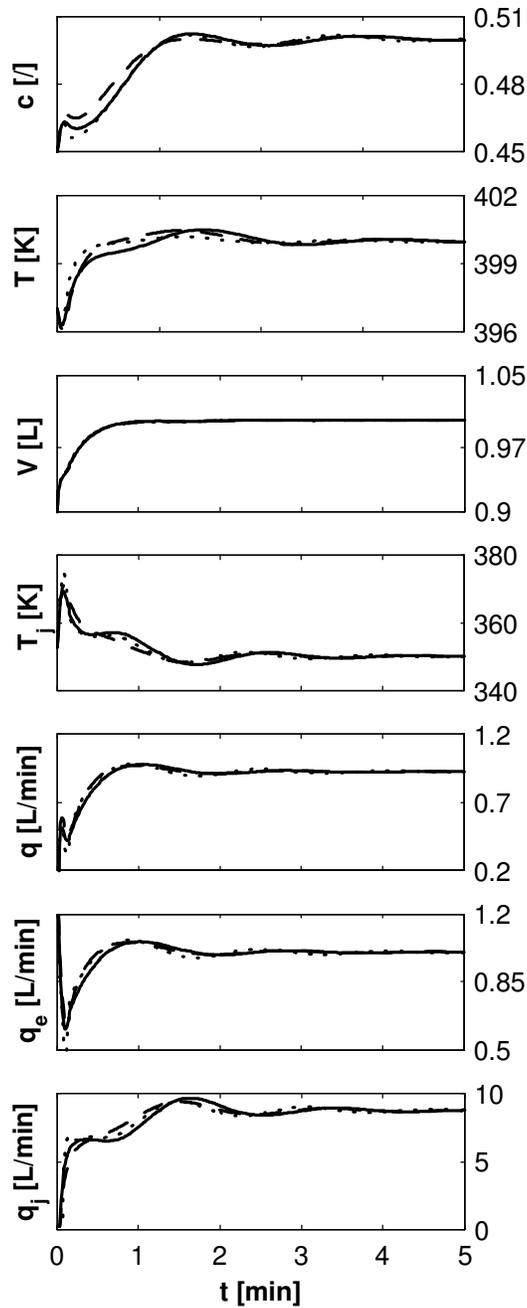


Figura 4.6: Respuesta a lazo cerrado con el control QLD FF-OF (4.111)-(4.114) con diferentes pares de ganancias para el control en cascada de temperatura $(k_T, k_j) = (3, 12)(-)$, $(6, 6)(-\cdot-)$ y $(12, 12)(\cdot\cdot\cdot)$.

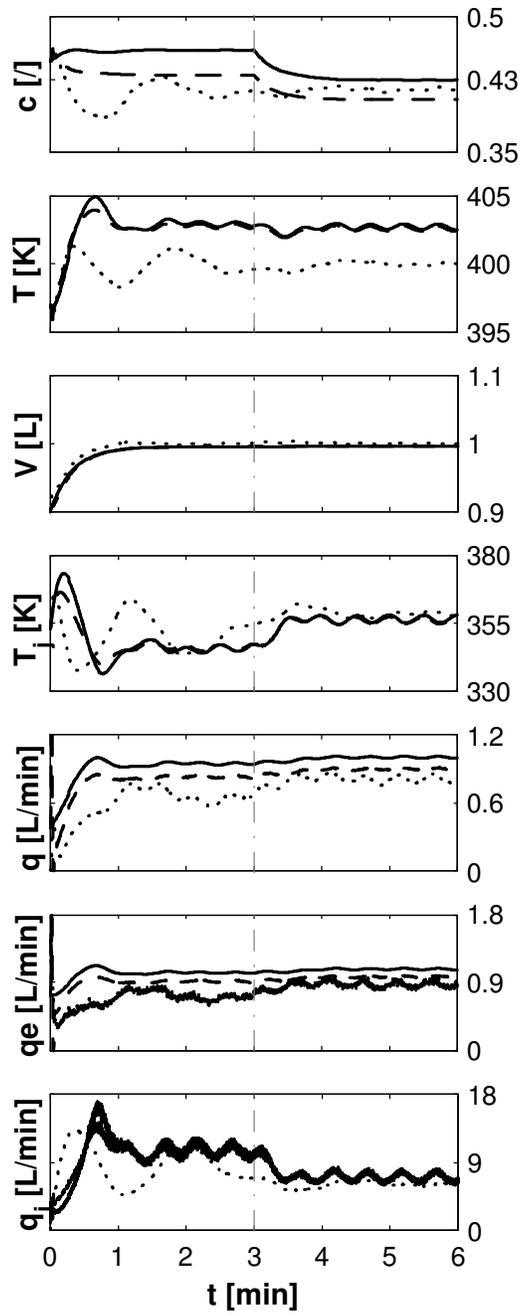


Figura 4.7: Respuesta robusto a lazo cerrado con los controles NLP FF-SF (3.31)-(3.35)(-), FF-OF+FEK (4.17)-(4.29)(- -) y QLD FF-OF (4.111)-(4.114)(\cdots).

Capítulo 5

Diseño del controlador de salida propuesto para el reactor con cinética no monótona

Las reacciones con cinética no monótona no son tan comunes como las de cinética monótona. Sin embargo, existe un importante grupo de reacciones químicas y biológicas con comportamiento no monótono, por ejemplo: reacciones autocatalíticas, reacciones inhibidas por el producto y reacciones exotérmicas adiabáticas. Una característica fundamental de los reactores con cinética de reacción no monótona es que, por lo regular, deben operar alrededor de un punto de equilibrio (posiblemente inestable a lazo abierto) con máxima velocidad de reacción, para lograr la mayor producción por unidad de tiempo.

En el capítulo introductorio se mostró que los reactores CSTR con cinética no monótona no son localmente observables alrededor de los puntos con máxima reacción. También se mostró, que a causa de presentar una tasa de reacción bivaluada se debe realizar el análisis de la dinámica isotérmica para determinar la observabilidad global del reactor. En caso de tener una dinámica isotérmica biestable entonces el reactor no es globalmente observable. Esta pérdida de propiedades de observabilidad implica la existencia de entradas malas que hace imposible construir un observador de concentración convergente con rapidez de convergencia arbitraria para cada entrada [37]. Sin embargo, como se ve en la Proposición 4 el reactor CSTR con cinética no monótona es detectable siempre que se opere en forma continua. Esta propiedad de detectabilidad impone restricciones en el diseño del

sistema de control-estimación, y es la que se utiliza para el diseño del control por retroalimentación de salidas acoplado con un estimador de entrada desconocida-detector de estado, que regule al reactor en el vector de salidas reguladas deseado, aun sin conocer todas las funcionalidades del reactor y sus entradas exógenas.

Siguiendo un procedimiento similar al del caso monótono, en este capítulo se diseña de forma constructiva un control que regule al reactor con cinética no monótona alrededor de una salida deseada. La idea central consiste de nuevo en explotar las propiedades de pasividad y detectabilidad que tiene el sistema para reescribir el modelo matemático del reactor de tal forma que las entradas desconocidas puedan estimarse (y la concentración pueda detectarse) a partir de las mediciones. El diseño y el controlador resultante son muy similares al caso monótono, sin embargo la propiedad de detectabilidad de estado modifica varios aspectos: (i) el lazo de estimación-control de concentración, (ii) la dinámica de error y por ende las condiciones de estabilidad y (iii) las señales recuperadas con el esquema de estimación. Como varios de los pasos del enfoque constructivo son muy similares al caso monótono se toma especial cuidado en hacer notar las diferencias y las limitaciones en el diseño y desempeño del controlador propuesto para el caso no monótono.

5.1 Modelo matemático para el diseño del controlador FF-OF

En esta sección se rediseña el modelo matemático del reactor buscando hacer compatibles las propiedades intrínsecas de pasividad y detectabilidad del reactor con el propio diseño del controlador. El propósito, de nuevo, es obtener un modelo que refleje satisfactoriamente el comportamiento dinámico del sistema y que a la vez sea lo más descentralizado y lineal posible.

5.1.1 Observabilidad con entradas desconocidas

A diferencia del reactor CSTR con cinética monótona que es estado-entradas desconocidas estimable (x, d_m -estimable) [43], el reactor con cinética no monótona sólo es entrada desconocida estimable, pues no es posible estimar todo el vector de estado x . En este caso, las entradas desconocidas son los valores instantáneos de las funciones $\pi(c, T, V)$, $\rho(c, T)$ y $\gamma(c, T, V, T_j)$.

Para poder concluir lo anterior, se reescribe el modelo del reactor (2.1) de la siguiente forma:

$$\dot{V} = -\iota + q_e - q, \quad y_V = V \quad (5.1)$$

$$\dot{T} = \Delta r - \frac{q_e}{V} (T - T_e) - \eta (T - T_j), \quad y_T = T \quad (5.2)$$

$$\dot{T}_j = \varpi V \eta (T - T_j) - \varpi_j q_j (T_j - T_{je}), \quad y_j = T_j \quad (5.3)$$

$$\dot{c} = -r + \frac{q_e}{V} (c_e - c), \quad (5.4)$$

$$d_m : = [\iota, r, \eta]^T \quad (5.5)$$

$$\iota = \pi(c, T, V) \quad (5.6)$$

$$r = \rho(c, T) \quad (5.7)$$

$$\eta = \gamma(c, T, V, T_j) \quad (5.8)$$

este modelo tiene cuatro estados $x = [c, V, T_j, T]^T$, tres entradas desconocidas d_m y tres mediciones $y = (y_V, y_T, y_j)$. Nótese que a diferencia del caso monótono: (i) el modelo (5.1)-(5.5) es completamente independiente de la función de cinética de reacción $\rho(c, T)$, (ii) no existe la medición virtual de concentración, ya que en general no es posible escribir una función tipo sensor por “software” $y_c = \sigma(r, y_T)$ para determinar el valor instantáneo de concentración porque que la solución de r puede ser bivaluada, y (iii) el vector de entradas desconocidas d_m se ha reducido de cuatro a sólo tres elementos, pues ya no es posible determinar la concentración de entrada c_e .

Dado que las condiciones de solubilidad garantizan que

$$T \neq T_j, \quad \Delta \neq 0$$

y la forma de operación continua garantiza que nunca se vacíe el reactor $V \neq 0$, el conjunto de cinco ecuaciones (5.1)-(5.5) tiene solución única para las tres entradas desconocidas $d_m = [\iota, r, \eta]^T$

$$V = y_V \quad (5.9)$$

$$\iota = q_e - q - \dot{y}_V \quad (5.10)$$

$$T_j = y_j \quad (5.11)$$

$$\eta = \frac{\dot{y}_j + \varpi_j q_j (y_j - T_{je})}{\varpi y_V (y_T - y_j)} \quad (5.12)$$

$$T = y_T \quad (5.13)$$

$$r = \frac{\dot{y}_T + \frac{q_e}{y_V} (y_T - T_e) + \frac{\dot{y}_j + \varpi_j q_j (y_j - T_{je})}{\varpi y_V}}{\Delta} \quad (5.14)$$

De la propiedad de estimabilidad de estado extrapolada a entradas desconocidas surge la siguiente proposición:

Proposición 9 *El modelo del reactor (5.1-5.5) es entrada desconocida estimable [d_m -estimable] con el siguiente orden de estimación:*

$$oe(d_m) = (\nu_\iota, \nu_\eta, \nu_r) = (2, 2, 2)$$

si y sólo si:

$$(i) \ T \neq T_j, \quad (ii) \ \Delta \neq 0, \quad (iii) \ V \neq 0.$$

El orden de estimación $(\nu_\iota, \nu_\eta, \nu_r) = (2, 2, 2)$ da como resultado el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$y_V = V \quad (5.15)$$

$$\dot{y}_V = -\iota + q_e - q \quad (5.16)$$

$$y_j = T_j \quad (5.17)$$

$$\dot{y}_j = \varpi y_V \eta (y_T - T_j) - \varpi_j q_j (y_j - T_{je}) \quad (5.18)$$

$$y_T = T \quad (5.19)$$

$$\dot{y}_T = \Delta r - \frac{q_e}{y_V} (y_T - T_e) - \eta (y_T - y_j) \quad (5.20)$$

De este sistema de ecuaciones se obtiene (5.9)-(5.14) si se cumplen condiciones (i), (ii) y (iii).♦

Se puede observar que en comparación con el caso monótono: (i) las condiciones de solubilidad son sólo tres, (ii) estas condiciones son iguales a las primeras tres que se requieren para el caso monótono y (iii) el orden de estimación se transforma de (2, 2, 3) en el caso monótono a (2, 2, 2) en el caso no monótono, ya que la segunda derivada de la señal de temperatura no permite determinar en forma unívoca el valor de concentración de entrada c_e . La proposición (9) implica que el nuevo vector de entradas desconocidas $d_m = [\iota, r, \eta]^T$ puede ser estimado arbitrariamente rápido.

Sin embargo, en este caso la sustitución de la ecuación (5.14) en (5.4) genera la dinámica indistinguible de concentración:

$$\dot{c} = -\frac{\dot{y}_T + \frac{q_e}{y_V} (y_T - T_e) + \frac{\dot{y}_j + \varpi_j q_j (y_j - T_{je})}{\varpi y_V}}{\Delta} + \frac{q_e}{y_V} (c_e - c), \quad c(0) = c_0 \quad (5.21)$$

El análisis de detectabilidad muestra que una tasa de dilución positiva $\frac{q_e}{V} > 0$ garantiza la detectabilidad del reactor, es decir, la estabilidad de la dinámica del error ε_c entre dos trayectorias indistinguibles

$$\dot{\varepsilon}_c + \frac{q_e}{V} \varepsilon_c = 0$$

o equivalentemente la convergencia de las trayectorias indistinguibles de concentración. Por lo tanto, para reactores con cinética no monótona en operación continua las dinámicas indistinguibles (si existen) convergen entre si y esto permite que la concentración pueda ser estimada inclusive con un observador a lazo abierto.

La dinámica indistinguible de concentración (5.21) reescrita en función del valor instantáneo de la cinética de reacción r como:

$$\dot{c} = -r + \frac{q_e}{y_V} (c_e - c)$$

muestra que conociendo r, q_e, y_V , y c_e el subsistema (5.21) es detectable. Por lo que de la combinación de las Proposiciones 9 y 4 surge la siguiente proposición:

Proposición 10 *El modelo del reactor (5.1-5.5) es entrada desconocida estimable [d_m -estimable] con orden de estimación*

$$eo(x_p, d_m) = (\nu_\iota, \nu_\eta, \nu_r) = (2, 2, 2)$$

y c -detectable si y sólo si:

$$\begin{aligned} T &\neq T_j \\ \Delta &\neq 0 \\ V &\neq 0 \\ \frac{q_e}{V} &> 0. \blacklozenge \end{aligned}$$

Nótese que en el caso monótono las entradas desconocidas (ι, r, η, c_e) y la concentración de reactante c pueden ser estimadas arbitrariamente rápido, mientras que en caso no monótono: (i) sólo las entradas desconocidas (ι, r, η) pueden ser estimadas arbitrariamente rápido, (ii) la velocidad de estimación de concentración c queda determinada por la tasa de dilución del reactor $\theta = \frac{q_e}{V}$, (iii) no es posible reconstruir la concentración de entrada c_e , y (iv) la concentración de entrada c_e debe conocerse para la observación del estado no medido c .

5.1.2 Modelo quasi lineal y descentralizado (QLD)

En esta sección el modelo d_m -observable c -detectable (5.1)-(5.5) se reescribe en una forma quasi lineal y descentralizada con el propósito de utilizar este modelo para el diseño del controlador.

El cambio de coordenadas es nuevamente de d_m a b , es decir de un vector de entradas desconocidas a un vector de cargas desconocidas.

$$b = [b_V, b_T, b_j]^T \quad (5.22)$$

$$b_V = q_e - q - \iota + a_V q \quad (5.23)$$

$$b_j = \varpi V \eta (T - T_j) - [\varpi_j (T_j - T_{je}) - a_j] q_j \quad (5.24)$$

$$b_T = \Delta r - q_e (T - T_e) / V - \eta T + (\eta - a_T) T_j \quad (5.25)$$

donde las ganancias nominales estáticas (a_V, a_j, a_T) fueron definidas anteriormente (4.76)-(4.78). Nótese que ahora el vector de cargas desconocidas b sólo tiene tres elementos.

Se definen también tres funciones no lineales

$$b_V = \beta_V(c, V, T, q, q_e) \quad (5.26)$$

$$b_j = \beta_j(c, V, T, T_j, q_j, T_{je}) \quad (5.27)$$

$$b_T = \beta_T(c, V, T, T_j, q_e, T_e) \quad (5.28)$$

$$\beta = [\beta_V, \beta_j, \beta_T]^T \quad (5.29)$$

$$b = \beta(x, u, d_a) \quad (5.30)$$

A cada carga desconocida le corresponde una entrada desconocida.

$$\begin{aligned} b_V &\sim \iota \\ b_j &\sim \eta \\ b_T &\sim r \end{aligned}$$

de esta forma el modelo del reactor (4.38) puede ser escrito como

$$\dot{V} = -a_V q + b_V, \quad y_V = z_V = V \quad (5.31)$$

$$\dot{T} = a_T T_j + b_T, \quad y_T = z_T = T \quad (5.32)$$

$$\dot{T}_j = -a_j q_j + b_j, \quad y_j = T_j \quad (5.33)$$

$$\dot{c} = -r + \frac{q_e}{y_V} (c_e - c), \quad y_c = z_c = c \quad (5.34)$$

De nueva cuenta, el valor instantáneo de la funciones cinética de reacción r y dilución de calor η puede escribirse en función de las cargas desconocidas b_T y b_j .

$$\begin{aligned} \eta &= \Phi_\eta = \frac{b_j + [\varpi_j (T_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi V (T - T_j)} \\ r &= \Phi_r = \frac{b_T + \frac{q_e}{V} (T - T_e) + \frac{b_j + [\varpi_j (T_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi V} + a_T T_j}{\Delta} \end{aligned}$$

Aplicando el cambio de coordenadas (5.22)-(5.25) al modelo d_m -observable c -detectable (5.1)-(5.5) se obtiene el siguiente modelo c -detectable, b -observable, $(b - y)$ -pasivo quasi-lineal dinámico (QLD):

$$\dot{V} = -a_V q + b_V, \quad y_V = z_V = V \quad (5.35)$$

$$\dot{T} = a_T y_j + b_T, \quad y_T = z_T = T \quad (5.36)$$

$$\dot{T}_j = -a_j q_j + b_j, \quad y_j = T_j \quad (5.37)$$

$$\dot{c} = \alpha(c, y, u_h, b_h, d_a), \quad z_c = c \quad (5.38)$$

donde: u_h, b_h , y d_a fueron definidas anteriormente y la función

$$\alpha(c, y, u_h, b_h, d_a) = \alpha(c, y_T, y_j, y_V, q_e, q_j, b_T, b_j, c_e, T_{je})$$

es:

$$\alpha = -\frac{b_T + \frac{q_e}{y_V} (y_T - T_e) + \frac{b_j + [\varpi_j (y_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi y_V} + a_T y_j}{\Delta} + \frac{q_e}{y_V} [(c_e - c)]$$

Este modelo tiene: (i) cuatro estados (V, T, T_j, c), (ii) tres entradas de control (q, q_j, q_e), tres salidas reguladas (V, T, c), tres salidas medidas (y_V, y_T, y_j), los siguientes órdenes de estimación (eo)

$$eo(b) = (\nu_V, \nu_j, \nu_T) = (2, 2, 2) = 6$$

y los siguientes grados relativos (rd)

$$rd(u, z) = (q, z_V), (q_j, T_j), (T_j, z_T), (q_e, z_c) = [1, 1, 1, 1] = 4 \quad (5.39)$$

$$rd(b, y) = (b_V, V), (b_j, T_j), (b_T, T) = (1, 1, 1) \quad (5.40)$$

Este modelo (5.35)-(5.38), considerablemente menos interactuado y dependiente de las funciones desconocidas del modelo, y con menos términos no lineales, tiene tres parejas de carga-control ($b_V - q, b_j - q_j$, y $b_T - T_j$) que cumplen la condición “matching” [54], y a diferencia del modelo QLD para el caso monótono, es independiente de la función de cinética de reacción .

Este modelo se utiliza en la siguiente sección para diseñar el control por prealimentación y retroalimentación de salidas.

5.2 Control prealimentado y por retroalimentación de estado (FF-SF) con el modelo quasi-lineal dinámico (QLD)

En esta sección se hace el diseño de un control FF-SF utilizando el modelo simplificado QLD (5.35)-(5.38) del reactor no monótono. Este paso de control constructivo es muy similar al caso monótono y muestra la forma del controlador FF-OF, que se diseña en la siguiente sección, con el modelo matemático simplificado del reactor.

Por el momento se asume que se conoce perfectamente el vector de error de cargas $b = [b_V, b_j, b_T]^T$. El diseño consiste en forzar la dinámica de error pasivada

$$\begin{aligned}\alpha(c, y, u_h, b_h, d_a) &= -k_c e_c \\ -a_V q + b_V &= -k_V e_V \\ a_T T_j^* + b_T &= -k_T e_T + a_T e_j^* \\ -a_j q_j + b_j - \dot{T}_j^* &= -k_j e_j^* - a_T e_T\end{aligned}$$

donde los errores de regulacion (e_v, e_c, e_T, e_j^*) y la función α han sido definidas antes. La única solución para (q_e, q, T_j^*, q_j) de este conjunto de ecuaciones da como resultado el *control pasivo FF-SF*.

$$q_e = \lambda(y, c, q_j, b_h, d_a) \quad (5.41)$$

$$q = \frac{b_V + k_V(V - \bar{V})}{a_V} \quad (5.42)$$

$$T_j^* = - \left[\frac{k_T(T - \bar{T}) + b_T}{a_T} \right] \quad (5.43)$$

$$q_j = \frac{k_j(T_j - T_j^*) + b_j - \dot{T}_j^* + a_T(T - \bar{T})}{a_j} \quad (5.44)$$

$$\dot{T}_j^* = - \left[\frac{k_T(a_T T_j + b_T) + \dot{b}_T}{a_T} \right] \quad (5.45)$$

donde la función $\lambda(y_V, y_j, y_T, c, q_j, b_T, b_j, c_e, T_{je}) = \lambda(y, c, q_j, b_h, d_a) = q_e$ se obtiene a partir de la dinámica en lazo cerrado de concentración

$$- \left[\frac{b_T + \frac{q_e}{y_V} (y_T - T_e) + \frac{b_j + [\varpi_j (y_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi y_V} + a_T y_j}{\Delta} \right] + \frac{q_e}{y_V} (c_e - c) = -k_c (c - \bar{c})$$

$$\frac{q_e}{y_V} \frac{-(y_T - T_e)}{\Delta} + \frac{q_e}{y_V} (c_e - c) - \frac{b_T + \frac{b_j + [\varpi_j (y_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi y_V} + a_T y_j}{\Delta} = -k_c (c - \bar{c})$$

y despejando para q_e

$$\frac{q_e}{y_V} \left[\frac{-(y_T - T_e)}{\Delta} + (c_e - c) \right] = -k_c c_e + \frac{b_T + \frac{b_j + [\varpi_j (y_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi y_V} + a_T y_j}{\Delta}$$

$$q_e = \lambda = \left[-k_c (c - \bar{c}) + \frac{a_T y_j + b_T + \frac{b_j + [\varpi_j (y_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi y_V}}{\Delta} \right] \left[\frac{y_V}{(c_e - c) - \frac{(y_T - T_e)}{\Delta}} \right]$$

Nótese que si en este control (5.41)-(5.45) se hace

$$(a_V, a_T, a_j) = (\bar{a}_V, \bar{a}_T, \bar{a}_j)$$

y la carga b se reemplaza por su valor exacto

$$b = \beta(x, u, d, w) - \bar{b} \quad (5.46)$$

$$\beta(x, u, d, w) = f(x, d, w, u) - Au \quad (5.47)$$

$$A = \text{diag}(-a_V, a_T, -a_j) \quad (5.48)$$

al igual que el caso monótono se recupera exactamente el control NL FF-SF (3.31)-(3.35) diseñado con el modelo detallado (2.1).

En la siguiente sección se utiliza el control (5.41)-(5.45) y el modelo QLD (5.35)-(5.38) para diseñar el control prealimentado y por retroalimentación de salida.

5.3 Control prealimentado y por retroalimentación de salida [Feedforward Output-Feedback (FF-OF)]

En esta sección el comportamiento del control pasivo por prealimentación y reatrolimentación de estados NLP FF-SF, con modelo exacto, (3.31)-(3.36) se recupera utilizando el control (4.91)-(4.95) acoplado con un observador de entradas desconocidas b y un detector del estado no medido c . El diseño constructivo, busca obtener en el control resultante características de linealidad, descentralización e independencia del modelo, sobre todo en las funciones inciertas del mismo.

Para el diseño, de nuevo suponemos que la entrada desconocida varía de tal forma que se puede encontrar una velocidad de reconstrucción $\omega_a > 0$ tal que

$$\left| \dot{b}_a \right| \ll \omega_a |b_a|, \quad a = V, j, T$$

Recuperando el modelo quasi-lineal dinámico (QLD) (5.35)-(5.38):

$$\dot{V} = -a_V q + b_V, \quad y_V = z_V = V \quad (5.49)$$

$$\dot{T} = a_T y_j + b_T, \quad y_T = z_T = T \quad (5.50)$$

$$\dot{T}_j = -a_j q_j + b_j, \quad y_j = T_j \quad (5.51)$$

$$\dot{c} = \alpha(c, y, u_h, b_h, d_a), \quad z_c = c \quad (5.52)$$

y aplicando a cada elemento del vector de carga b un observador de orden reducido (Apéndice B) se obtiene:

$$\dot{\chi}_V = -\omega_V \chi_V - \omega_V (\omega_V y_V - q)$$

$$\dot{\chi}_j = -\omega_j \chi_j - \omega_j (\omega_j y_j - a_j q_j)$$

$$\dot{\chi}_T = -\omega_T \chi_T - \omega_T (\omega_T y_T - a_T y_j)$$

donde el estimado de cada carga es:

$$\hat{b}_V = \chi_V + \omega_V y_V$$

$$\hat{b}_j = \chi_j + \omega_j y_j$$

$$\hat{b}_T = \chi_T + \omega_T y_T$$

Por otro lado, apoyados en la propiedad de detectabilidad del reactor con cinética no monótona se propone un detector de concentración partiendo de la dinámica de concentración

$$\dot{c} = -r + \frac{q_e}{y_V} (c_e - c)$$

y el valor instantáneo de la función cinética de reacción r en función de los estimados de las cargas desconocidas \hat{b}_T y \hat{b}_j .

$$\hat{r} = \frac{\hat{b}_T + \frac{q_e}{V} (T - T_e) + \frac{\hat{b}_j + [\varpi_j(T_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi V} + a_T T_j}{\Delta}$$

Utilizando el valor de estimación de cinética de reacción \hat{r} como una medición virtual, se propone el siguiente detector (observador a lazo abierto) de concentración:

$$\dot{\hat{c}} = -\hat{r} + \frac{q_e}{y_V} (c_e - \hat{c})$$

este detector se puede escribir en terminos de la funcion $\alpha(c, y, u_h, b_h, d_a)$ valuada con $c = \hat{c}$ y $b_h = \hat{b}_h$ como:

$$\dot{\hat{c}} = \alpha(\hat{c}, y, u_h, \hat{b}_h, d_a)$$

Sustituyendo los valores estimados de la concentración \hat{c} y del vector de cargas \hat{b} en el control *control pasivo FF-SF* (5.41)-(5.45) y recordando la suposición de diseño $|\dot{\hat{b}}_T| \ll \omega_T |b_T|$ se obtiene:

$$q_e = \lambda(y, \hat{c}, q_j, \hat{b}_h, d_a) \quad (5.53)$$

$$q = \frac{\hat{b}_V + k_V(V - \bar{V})}{a_V} \quad (5.54)$$

$$T_j^* = - \left[\frac{k_T(T - \bar{T}) + \hat{b}_T}{a_T} \right] \quad (5.55)$$

$$q_j = \frac{k_j(T_j - T_j^*) + \hat{b}_j - \dot{T}_j^* + a_T(T - \bar{T})}{a_j} \quad (5.56)$$

$$\dot{T}_j^* = - \left[\frac{k_T(a_T T_j + \hat{b}_T)}{a_T} \right] \quad (5.57)$$

$$\dot{\hat{c}} = \alpha(\hat{c}, y, u_h, \hat{b}_h, d_a) \quad (5.58)$$

La combinación del detector de concentración y del observador de cargas con el *control QLD FF-SF* (4.91)-(4.95) da por resultado el *control QLD FF-OF*

• Control de volumen (5.59)

$$\begin{aligned} \dot{\chi}_V &= -\omega_V \chi_V - \omega_V (\omega_V y_V - a_V q) \\ q &= \frac{k_V(y_V - \bar{V}) + \omega_V y_V + \chi_V}{a_V} \end{aligned}$$

• Control de temperatura (5.60)

$$\begin{aligned} \dot{\chi}_T &= -\omega_T \chi_T - \omega_T (\omega_T y_T - a_T y_j) \\ T_j^* &= - \left[\frac{k_T(y_T - \bar{T}) + \omega_T y_T + \chi_T}{a_T} \right] \\ \dot{T}_j^* &= -k_T(y_j - T_j^*) - \frac{k_T}{a_T} (\omega_T y_T + \chi_T) \\ \dot{\chi}_j &= -\omega_j \chi_j - \omega_j (\omega_j y_j - a_j q_j) \\ q_j &= \frac{k_j(y_j - T_j^*) + \omega_j y_j + a_T(y_T - \bar{T}) - \dot{T}_j^* + \chi_j}{a_j} \end{aligned}$$

$$\bullet \text{ Control de concentración} \quad (5.61)$$

$$\begin{aligned} \dot{\hat{c}} &= \beta(\hat{c}, y, u_h, \chi_h, d_a) \\ q_e &= \gamma(\hat{c}, y, q_j, \chi_h, d_a) \end{aligned} \quad (5.62)$$

donde las funciones β y γ son:

$$\begin{aligned} \beta(\hat{c}, y, u_h, \chi_h, d_a) &= \alpha(\hat{c}, y, u_h, \hat{b}_h, d_a) \big|_{\hat{b}_h = \chi_h + \Omega_h y} \\ \gamma(\hat{c}, y, q_j, \chi_h, d_a) &= \lambda(\hat{c}, y, q_j, \hat{b}_h, d_a) \big|_{\hat{b}_h = \chi_h + \Omega_h y} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta &= - \left[\frac{a_T y_j + \chi_T - \omega_T y_T + \frac{\chi_j - \omega_j y_j + [\varpi_j (y_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi y_V}}{\Delta} \right] + \frac{q_e}{y_V} \left[\frac{y_T - T_e}{\Delta} + (c_e - \hat{c}) \right] \\ \gamma &= \left[-k_c(\hat{c} - \bar{c}) + \frac{a_T y_j + \chi_T - \omega_T y_T + \frac{\chi_j - \omega_j y_j + [\varpi_j (y_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi y_V}}{\Delta} \right] \left[\frac{y_V}{\frac{y_T - T_e}{\Delta} + (c_e - \hat{c})} \right] \end{aligned}$$

el control propuesto: (i) consiste en 4 ecuaciones diferenciales ordinarias, una por cada elemento del vector de cargas y una por el detector de concentración, y 5 ecuaciones algebraicas, (ii) el componente de concentración es un control por balance de material manejado por la información generada en el control de temperatura y no requiere de la función cinética de reacción, y (iii) los componentes de temperatura y volumen son independientes del componente de concentración y son exactamente iguales al caso no monótono.

Como un producto secundario el *control QLD FF-OF* propuesto para el reactor con cinética no monótona permite obtener estimados en línea de los valores instantáneos de las funciones cinética de reacción r , coeficiente de intercambio de calor η , y factor de contracción ι . Esto se logra a partir de la definición de cargas desconocidas y utilizando el mismo procedimiento que para el caso monótono, dando como resultado:

$$\hat{r} = \frac{\chi_T + \omega_T y_T + a_T y_j + \frac{q_e}{y_V} (y_T - T_e) + \frac{\chi_j + \omega_j y_j - a_j q_j + \varpi_j q_j (y_j - T_{je})}{\varpi y_V}}{\Delta} \quad (5.63)$$

$$\hat{\eta} = \frac{-a_j q_j + \chi_j + \omega_j y_j + \varpi_j q_j (y_j - T_{je})}{\varpi y_V (y_T - y_j)} \quad (5.64)$$

$$\hat{i} = q_e - q + a_V q - \chi_V - \omega_V y_V \quad (5.65)$$

Las tres señales estimadas pueden calcularse sin interferir en el funcionamiento del control propuesto y se pueden utilizar para propósitos de monitoreo. Las condiciones necesarias son las mismas que para el caso monótono y se cumplen en todos los reactores CSTR.

Cabe señalar que en este caso ya no es posible obtener un estimado en línea para el valor de concentración de entrada c_e . Esto se puede deducir de las ecuaciones utilizadas en el caso monótono

$$y_c = \sigma(r, y_T) \quad (5.66)$$

$$c_e = \left[\frac{T + \frac{d\left[\frac{q_e}{y_V}(y_T - T_e) + \eta(y_T - y_j)\right]}{dt} - \Delta \rho_T \dot{y}_T}{\Delta \rho_c} + r \right] \frac{y_V}{q_e} + y_c \quad (5.67)$$

La señal c_e depende del valor estimado de concentración y_c que a su vez depende de la función $\sigma(r, y_T)$. Como en este caso no monótono la solución es bivaluada el valor de y_c calculado también lo es. Esto puede generar un valor erróneo de c_e .

5.3.1 Control escrito en términos de componentes PI e I

Retomando la definición de las constantes κ_a y t_a con $a = V, j, T$, los bloques de control Integral y Proporcional-Integral (4.144) definidos previamente en el caso monótono y un nuevo bloque de control integral:

$$I_c(c, \psi, v_h, \chi_T, \chi_j, d_a) = -k_c \int_0^t \beta(c, \psi, v_s, \chi_T, \chi_j, d_a) dt$$

el control en lazo cerrado (5.59)-(5.61) para cinética no monótona se puede reescribir como:

$$\begin{aligned} & \bullet \text{ Control de volumen} & (5.68) \\ v_q &= PI_V(\psi_V) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \bullet \text{ Control de temperatura} & (5.69) \\ \tau^* &= PI_T(\psi_T) + I_j^b(\psi_j - \tau^*) \\ \dot{\tau}^* &= I_j^d(\psi_j - \tau^*) - PI_T^d(\psi_T) - PI_j^d(\psi_j) \\ \dot{\chi}_j &= \omega_j \left[a_T I_T^h(\psi_T) - \frac{k_j}{\omega_T} I_j^b(\psi_j - \tau^*) - \tau^* \right] \\ v_{q_j} &= PI_j(\psi_j - \tau^*) + PI_T^b(\psi_T) + \frac{\dot{\tau}^*}{a_j} \\ \dot{\chi}_T &= -\omega_T [k_j I_T^h(\psi_T) - a_T I_j^b(\psi_j - \tau^*)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \bullet \text{ Control de concentración} & (5.70) \\ v_{q_e} &= \gamma(c, \psi, v_{q_j}, \chi_T, \chi_j, d_a) \\ c &= I_c(c, \psi, v_s, \chi_T, \chi_j, d_a) \end{aligned}$$

Este controlador (Fig. 5.1), al igual que en el caso monótono, consiste en una estructura de control PI clásico comúnmente utilizada en la práctica industrial de control de reactores (bloques en color gris), más nuevos bloques de control (bloques color blanco) generados a partir del diseño constructivo.

El esquema convencional consiste en bloques de control descentralizado de volumen PI_V y en cascada de temperatura (PI_T, PI_j) y un control manual del gasto de entrada fijado en su valor nominal y recalibrado con mediciones periódicas de concentración fuera de línea, es decir:

$$\begin{aligned} v_q &= PI_V(\psi_V) \\ \tau^* &= PI_T(\psi_T) \\ v_{q_j} &= PI_j(\psi_j - \tau^*) \\ v_{q_e} &= \bar{v}_{q_e} \end{aligned}$$

Los nuevos bloques de control son los mismos que en el caso monótono, excepto que en el lazo de concentración ya no es posible un bloque de control PI. Ahora se tiene un bloque integral (I_c) alimentado por un estimador de concentración a lazo abierto (β) que utiliza la información del lazo de control de temperatura y que permite habilitar un control en lazo cerrado de concentración.

Cabe señalar, que de nueva cuenta es preferible implementar el controlador propuesto en la forma QLD FF-OF (5.59)-(5.61) por sobre la forma PI-inventario (4.145)-(4.147) porque el primero tiene un esquema anti “wind-up” intrínsecamente.

5.4 Estabilidad a lazo cerrado y sintonización

Las condiciones de estabilidad a lazo cerrado del controlador propuesto para un reactor no monótono (5.59)-(5.61) se establecen en esta sección. También se establecen las guías de sintonización del mismo. La definición de estabilidad local utilizada es la misma que en el caso monótono.

El reactor (2.1) con el controlador (5.59)-(5.61) tiene la siguiente dinámica a lazo cerrado (Apéndice D):

$$\dot{e}_y = -A_y e_y - \tilde{b}_y \quad (5.71)$$

$$\dot{\tilde{b}}_y = -\Omega_y \tilde{b}_y - \theta_y(e, \varepsilon_c, \tilde{b}_y, \tilde{d}_a, \dot{\tilde{d}}_a) \quad (5.72)$$

$$\dot{\varepsilon}_c = -k_c \varepsilon_c - \lambda_\varepsilon(e_c, e_y, \varepsilon_c, \tilde{b}_y, d_a) \varepsilon_c + h(e_y, \tilde{b}_T, \tilde{b}_j) \quad (5.73)$$

$$\dot{\varepsilon}_c = -\lambda_\varepsilon(e_c, e_y, \varepsilon_c, \tilde{b}_y, d_a) \varepsilon_c - h(e_y, \tilde{b}_T, \tilde{b}_j) \quad (5.74)$$

donde: $e_y, e_c, \tilde{b}_y, \tilde{b}_T, \tilde{b}_j, A_y, \Omega_y, \tilde{d}_a$ fueron definidas anteriormente en el caso monótono y

$$\begin{aligned} \varepsilon_c &= \hat{c} - c = c - e_c \\ \theta_y(0, 0, 0, 0, 0) &= 0 \\ h_\varepsilon(0, 0, 0) &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
h(e_y, \tilde{b}_T, \tilde{b}_j) &= \frac{1}{\Delta} \left[\tilde{b}_T + \frac{\tilde{b}_j}{\varpi(e_V + \bar{V})} \right] \\
\lambda_\epsilon(e_c, e_y, \epsilon_c, \tilde{b}_y, d_a) &= \frac{q_e}{e_V + \bar{V}} \\
\theta_y(e, \epsilon_c, \tilde{b}_y, \dot{\tilde{d}}_a, \ddot{\tilde{d}}_a) &= \dot{b}_y = \frac{\partial \beta}{\partial e} f + \frac{\partial \beta}{\partial \epsilon_c} \dot{\epsilon}_c + \frac{\partial \beta}{\partial \delta_y} \dot{d}_a + \frac{\partial \beta}{\partial \tilde{d}_a} \dot{\tilde{d}}_a \\
\beta(e, d_a, u) &= f(x, u, d, w) - Au \\
A &= \text{diag}(-a_V, a_T, -a_j)
\end{aligned}$$

(e_y, e_c) son los errores de regulación, \tilde{b}_y es el error de estimación de carga, y ϵ_c es el error de estimación de concentración. Para establecer las condiciones de estabilidad se introducen las siguientes definiciones:

$$\begin{aligned}
k_p &= (k_c, k_V, k_j, k_T) \\
\omega_p &= (\omega_V, \omega_j, \omega_T) \\
k_y &= \min(k_V, k_j, k_T) \\
\omega_y &= \min(\omega_V, \omega_j, \omega_T)
\end{aligned}$$

De la aplicación del teorema de pequeñas ganancias [49] en el formato empleado en [31] surge la siguiente proposición:

Proposición 11 *La dinámica en lazo cerrado del reactor (2.1) con el control (5.59-5.61) es P estable si las ganancias (k_p, ω_p) y el dominio de atracción*

cumplen las siguientes condiciones

$$L(\lambda_c, \epsilon_c) > 0 \quad (5.75)$$

$$k_c > -L(\lambda_e, e_c) + \frac{L(\lambda_e, e_c)L(\lambda_e, \epsilon_c)}{L(\lambda_e, \epsilon_c)} \quad (5.76)$$

$$\omega_y > L(\theta_y, \tilde{b}_y) \quad (5.77)$$

$$k_y > \frac{L(\theta_y, e_y)}{\omega_y - L(\theta_y, \tilde{b}_y)} \quad (5.78)$$

$$k_y > \frac{L(\theta_y, e_y)}{\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y)} + \dots$$

$$- \frac{L(\theta_y, e_c) \left[L(\lambda_e, \epsilon_c) \left(L(\lambda_e, \tilde{b}_y e_y) + L(h, \tilde{b}_y e_y) \right) \right]}{(k_c + L(\lambda_e, e_c)) L(\lambda_e, \epsilon_c) - L(\lambda_e, e_c) L(\lambda_e, \epsilon_c)}$$

$$+ \frac{L(\theta_y, e_c) \left[L(\lambda_e, \epsilon_c) \left(L(\lambda_e, \tilde{b}_y e_y) - L(h, \tilde{b}_y e_y) \right) \right]}{(k_c + L(\lambda_e, e_c)) L(\lambda_e, \epsilon_c) - L(\lambda_e, e_c) L(\lambda_e, \epsilon_c)} \quad (5.79)$$

donde $L_{x_i}^f$ denota la constante de Lipchitz de la función $f(x_1, \dots, x_n)$ con respecto al escalar x_i .

Las primeras dos condiciones (5.75)-(5.76) garantizan la estabilidad de la dinámica de concentración, las condiciones (5.77)-(5.78) garantizan la estabilidad de la dinámica de temperatura-volumen, mientras que la última condición (5.75) garantiza la estabilidad de toda la dinámica a lazo cerrado del reactor garantizando primero la estabilidad de la dinámica de los estados medidos

$$\frac{L(\theta_y, e_y)}{\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y)} > 0$$

y dominando el término de desestabilización

$$\begin{aligned}
k_y > \frac{L(\theta_y, e_y)}{\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y)} + \dots \\
& - \frac{L(\theta_y, e_c) \left[L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c) \left(L(\lambda_\epsilon, \tilde{b}_y e_y) + L(h, \tilde{b}_y e_y) \right) \right]}{(k_c + L(\lambda_\epsilon, e_c)) L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c) - L(\lambda_\epsilon, e_c) L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c)} \\
& + \frac{L(\theta_y, e_c) \left[L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c) \left(L(\lambda_\epsilon, \tilde{b}_y e_y) - L(h, \tilde{b}_y e_y) \right) \right]}{(k_c + L(\lambda_\epsilon, e_c)) L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c) - L(\lambda_\epsilon, e_c) L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c)}
\end{aligned}$$

debido a la interconexión de los subsistemas (4.134)-(4.135) con (4.136)-(4.137).

De estas condiciones de estabilidad se desprenden las siguientes guías de sintonización [4]:

1. Fije la ganancia de control de concentración igual a la tasa de dilución nominal (k_θ), las ganancias de control de temperatura y volumen tres veces más rápidas y las ganancias de observación de tres a cinco veces mas rápido (n_ω) que las respectivas de regulación.

$$\begin{aligned}
k_c &= \frac{\bar{q}}{V} := k_\theta \\
\omega_c &= n_\omega k_\theta \\
k_T &= k_j = k_V := k = 3k_\theta \\
\omega_T &= \omega_j = \omega_V := \omega = n_\omega k \\
n_\omega &= (3 \text{ a } 5)
\end{aligned}$$

2. Incremente gradualmente la ganancia de cada observador ω hasta obtener un comportamiento oscilatorio y encuentre ese valor límite ω^+ , regrese y fije $\omega = \omega^+/l$, donde $l \in [2, 3]$.
3. Incremente gradualmente la ganancia de cada controlador k hasta obtener un comportamiento oscilatorio y encuentre ese valor límite k^+ , regrese y fije $k = k^+/l$, donde $l \in [2, 3]$.
4. Incremente k_c hasta obtener un comportamiento aceptable en el lazo de concentración.
5. Si es necesario ajuste en forma individual las ganancias de control u observación para mejorar el desempeño.

5.5 Resumen

En esta sección se utiliza el control constructivo para el diseño de un controlador FF-OF a partir de un modelo cuasi-lineal-dinámico (QLD) que explota las propiedades de pasividad y detectabilidad del reactor CSTR con cinética no monótona, de tal forma que se logre la máxima descentralización, independencia del modelo y linealización del control tal como se hizo en el caso monótono.

La implementación del control QLD FF-OF propuesto logra una máxima independencia con respecto a las funciones que generalmente no están disponibles en medios industrializados: cinética de reacción, transporte de calor y contracción volumétrica (ρ , γ y π). El controlador propuesto sólo requiere de valores aproximados de los parámetros estáticos (a_T , a_j y a_V) para los lazos de control de temperatura y volumen que realizan la estabilización del reactor. Nótese que en este caso, el control de concentración no requiere de ningún parámetro estático ni de la función de cinética de reacción. Sin embargo este lazo de control no puede contrarrestar cambios en la concentración de entrada c_e como en el caso monótono, pues con la propiedad de observabilidad utilizada no es posible la estimación de esta entrada exógena. Sin embargo, para minimizar los efectos de esta entrada se pueden utilizar mediciones ocasionales fuera de línea que generalmente se efectúan para monitorear el producto.

5.6 Ejemplo de Aplicación no-monótono

En esta sección se presentan los resultados de simulaciones en lazo cerrado, con condiciones nominales y robustas, en un reactor de prueba con cinética no monótona con los controles NLP FF-SF (3.31)-(3.35), FF-OF+EKF (4.17)-(4.29) y QLD FF-OF (5.59)-(5.61). Se incluyen resultados de simulaciones donde se compara el control QLD FF-OF (5.59)-(5.61) en el reactor de prueba con y sin lazo de control de concentración.

5.6.1 Descripción del reactor de prueba

Considere el reactor (2.1) con las siguientes funciones no lineales de tasa de reacción ρ , tasa de dilución de calor γ y tasa de contracción volumétrica π :

$$\rho(c, T) = \frac{ce^{(a_\rho - \frac{b_\rho}{T})}}{(1 + c_\rho c)^2} \quad (5.80)$$

$$\gamma(c) = a_\gamma + b_\gamma c + c_\gamma c^2 \quad (5.81)$$

$$\pi(V, c, T) = \varepsilon_p \rho(c, T) V \quad (5.82)$$

con los siguientes parámetros

$$\begin{aligned} a_\rho &= 25, & b_\rho &= 10^4, & c_\rho &= 3, & a_\gamma &= 0.7, & b_\gamma &= 10.8, & c_\gamma &= 0.54 \\ \varepsilon_p &= 0.15, & \Delta &= 200, & \varpi_j &= 1, & \varpi &= 10 \end{aligned}$$

entradas de control nominales

$$\bar{q}_e = 0.989, \quad \bar{q} = 0.989, \quad \bar{q}_j = 8.685$$

y entradas exógenas nominales

$$\bar{T}_e = 370, \quad \bar{T}_{je} = 293, \quad \bar{c}_e = 1$$

Las dependencias de las funciones de tasa de dilución de calor γ y tasa de contracción volumétrica π fueron adoptadas de reacciones de polimerización [31]. La tasa de reacción no monótona es tipo Langmuir-Hinshelwood y fue adaptada de un reactor catalítico experimental [62].

La tasa de contracción volumétrica provoca que el reactor a lazo abierto con entradas constantes eventualmente se pueda vaciar. Esta situación se puede notar (figura 5.2) en las trayectorias divergentes que presenta el sistema en dos puntos muy cercanos entre sí:

$$x_{0E} = [0.332, 436.07, 370]^T, \quad x_{0I} = [0.334, 436.07, 370]^T$$

Para determinar el comportamiento a lazo abierto se utiliza el control ideal de volumen MB (4.148). Con este control ideal se puede determinar que el reactor tiene tres puntos de equilibrio (enumerados en la tabla 5.1), dos de ellos son estables, y corresponden al punto de extinción (S_E) e ignición (S_I) respectivamente y el tercero es un punto inestable (U). La adaptación hecha a la tasa de reacción logra que este punto de equilibrio inestable U al mismo tiempo sea de máxima producción, es decir el punto inestable pertenece al

conjunto de puntos que forman la región de máxima producción $U \in \Omega$ donde:

$$\Omega = \{\mathbf{x} \in \mathbf{X} \mid \rho_c(c, T) := \frac{\partial \rho(c, T)}{\partial c} = 0\}$$

de esta manera el reactor de prueba constituye un caso extremo. La proyección del plano de fase en el plano concentración-temperatura se muestra en la figura 4.3. Las trayectorias que presenta el sistema con las siguientes condiciones iniciales:

$$x_{0E} = [0.332, 436.07, 370]^T, \quad x_{0I} = [0.334, 436.07, 370]^T$$

en la vecindad del punto de equilibrio inestable U y con el control ideal de volumen MB (4.148) se presentan en la figura 5.4, mostrando que las trayectorias del reactor con este control tienden a los puntos de equilibrio estables de extinción e ignición respectivamente.

El objetivo de control consiste en regular al reactor en este punto de equilibrio inestable U con máxima tasa de reacción $U \in \Omega$.

$$\bar{z} = [\bar{c}, \bar{T}, \bar{V}]^T = [0.333, 436.07, 1]^T$$

5.6.2 Análisis de la dinámica isotérmica

En esta sección se analiza la dinámica isotérmica del reactor de prueba para determinar las condiciones bajo las cuales puede existir biestabilidad, recordando que este fenómeno puede presentarse en reactores con cinética no monótona según lo analizado en el capítulo introductorio. La función de cinética de reacción $\rho(c, T)$ del reactor de prueba (5.80) puede ser expresada como el producto de una función de concentración $\alpha(c)$ y otra de temperatura $\beta(T)$, donde:

$$\begin{aligned} \alpha(c) &= \frac{c}{(1 + c_\rho c)^2} \\ \beta(T) &= e^{(a_\rho - \frac{b_\rho}{T})} \end{aligned}$$

con los siguientes parámetros:

$$a_\rho = 25, \quad b_\rho = 10^4, \quad c_\rho = 3$$

Tabla 5.1: Puntos de equilibrio del reactor no monótono con entradas nominales

puntos de equilibrio	S_E	U	S_I
concentración [mol/L]	0.998	0.333	0.017
temperatura [K]	345.54	436.07	479.07
temperatura de camisa [K]	321.12	369.57	392.58
volumen [L]	1.0	1.0	1.0
condición local	estable	inestable	estable

es decir

$$\alpha(c) = \frac{c}{(1+3c)^2}$$

$$\beta(T) = e^{(25-\frac{10^4}{T})}$$

al valorar $\beta(T)$ en la temperatura nominal $\bar{T} = 436.07$ resulta:

$$\beta(T) = e^{(25-\frac{10^4}{436.07})} = 7.9082$$

y sustituyendo en la dinámica de concentración en estado estacionario se obtiene

$$\frac{7.9082c}{(1+3c)^2} = -\bar{\theta}c + \bar{\theta}c_e \quad (5.83)$$

El lado derecho de (5.83) es la ecuación de una recta con pendiente $-\bar{\theta}$ y ordenada al origen $\bar{\theta}c_e$, mientras que el lado izquierdo muestra el comportamiento de concentración debido a la cinética de reacción particular.

La solución gráfica de la curva y la recta de la dinámica de concentración en estado estacionario (5.83) se presenta en la figura 5.3. Se puede observar claramente que para condiciones nominales existe monoestabilidad de la dinámica de concentración.

5.6.3 Simulación y sintonización

Las pruebas nominales y robustas se realizaron en forma similar al caso monótono pues de nuevo su propósito es verificar el funcionamiento del control propuesto *versus* los controles NLP FF-SF (3.31)-(3.35) y FF-OF+EKF (4.17)-(4.29) con condiciones ideales (nominal) y realistas (robusta) para contrastar la recuperación del comportamiento de los controles por retroalimentación de salida contra el control por retroalimentación de estado e identificar las limitaciones que impone la cinética no monótona en comparación con el caso monótono. Se muestran también las respuestas del reactor de prueba con y sin lazo de control de concentración para determinar el efecto que este lazo tiene sobre la respuesta del sistema ante condiciones nominales y robustas.

En todas las pruebas las condiciones iniciales son cercanas al punto de equilibrio inestable U :

$$x(0) = [0.2, 430, 365, 0.9]^T$$

Las ganancias y condiciones iniciales del Filtro Extendido de Kalman y de los filtros de primer orden, las variaciones senoidales de las temperaturas de entrada del reactor T_e y de la camisa de enfriamiento T_{je} , el cambio escalón de la concentración de entrada c_e , y el ruido gaussiano añadido a las mediciones de temperatura y volumen son los mismos que en el caso monótono.

Los tres controladores utilizaron los siguientes valores aproximados de los parámetros:

$$\bar{a}_\rho = 0.996a_\rho, \quad \hat{b}_\rho = 1.005b_\rho, \quad \hat{c}_\rho = 1.006c_\rho, \quad \hat{\Delta} = 1.05\Delta, \quad (5.84)$$

$$\hat{\varepsilon}_\rho = 1.005\varepsilon_\rho, \quad \bar{a}_\gamma = 0.95a_\gamma, \quad \hat{b}_\gamma = 0.77b_\gamma, \quad \hat{c}_\gamma = 0.70c_\gamma \quad (5.85)$$

El control QLD FF-OF (5.59)-(5.61) utiliza los siguientes parámetros aproximados del modelo QLD (5.35)-(5.38)

$$\bar{a}_T = 0.8a_T, \quad \bar{a}_j = 1.25a_j, \quad \bar{a}_V = 0.75a_V$$

y las siguientes condiciones iniciales de los observadores

$$\chi_a(0) = -a_a u_a(0) - \omega_a y_a(0), \quad a = T, j, V.$$

La aplicación de las guías de sintonización después de cuatro iteraciones dieron como resultado las siguientes ganancias de control y estimación:

$$(k_c, k_V, k_T, k_j) = (2, 3, 3, 6), \quad (\omega_V, \omega_j, \omega_T) = (30, 20, 30)$$

Nótese que la ganancia del componente secundario de temperatura k_j es sólo dos veces mas rápida que la del componente primario k_T .

Los controles NLP FF-SF (3.31)-(3.35), FF-OF+EKF (4.17)-(4.29) utilizaron el valor nominal de concentración de entrada $\bar{c}_e = 1$, y las mismas ganancias de control que el control propuesto.

De la misma forma que el caso monótono, en las pruebas nominales se utilizan las mismas ganancias de control y estimación y mismas condiciones iniciales que en el caso robusto para poder compararlos equitativamente.

5.6.4 Comportamiento nominal.

De nueva cuenta, la prueba nominal es la mas desfavorable para el controlador propuesto (5.59)-(5.61) ya que éste sólo utiliza la información estática del modelo QLD (5.35)-(5.38), mientras que los controles NLP FF-SF (3.31)-(3.35), y FF-OF+EKF (4.17)-(4.29) utilizan la información del modelo dinámico detallado (2.1). En la Fig. (5.5) se muestra el comportamiento en lazo cerrado de cada uno de los controladores donde se observa que: (i) los tres controladores estabilizan al reactor en su punto de equilibrio inestable llevando a la tasa de reacción (ρ) a su máximo, (ii) el control NLP FF-SF presenta el mejor comportamiento (sobreamortiguado y con señales de control razonablemente lejos de saturación) ya que utiliza la medición de todos los estados y está basado en una propiedad de optimalidad, (iii) como consecuencia de la detectabilidad de estado y observabilidad de entrada desconocida del sistema el controlador FF-OF+EKF tiene un comportamiento muy similar al control NLP FF-SF y (iv) el control QLD FF-OF, después de un transitorio, recupera el comportamiento del controlador pasivo NLP FF-SF (3.31)-(3.36).

En la figura 5.6 se presentan los estimados del estado c y las funciones desconocidas (ρ, γ, ι) del control QLD FF-OF, mostrando que en concordancia con la propiedad de detectabilidad de estado y observabilidad de entrada desconocida los estimados convergen a su valor actual dos veces más rápido que la dinámica del reactor.

Para verificar que el controlador propuesto para el caso no monótono tampoco requiere separación dinámica entre el componente primario y secundario de temperatura se hacen tres simulaciones diferentes con los mismos juegos de ganancias utilizadas en el caso monótono:

$$(k_T, k_j) = (3, 12), (6, 6), (12, 12)$$

En la figura 5.7 se puede observar el resultado de la simulación mostrando que los tres pares de ganancias del lazo de temperatura tienen una respuesta transitoria satisfactoria, corroborando que los componentes adicionales de derivación del “setpoint” y de “backstepping” mejoran el comportamiento de un esquema de control en cascada convencional al no requerir separación dinámica entre maestro y esclavo.

5.6.5 Comportamiento Robusto

Las respuesta de la prueba robusta se presenta en la figura 5.8, mostrando que: (i) los tres controladores logran estabilidad práctica alrededor del estado estacionario inestable a lazo abierto y de máxima tasa de reacción, (ii) los controladores NLP FF-SF y FF-OF+EKF presentan desempeños similares, (iii) el controlador QLD FF-OF supera a los controles NLP FF-SF y FF-OF+EKF en $t > 3$ (asintótico) ya que tiene la menor desviación con respecto a la tasa de máxima producción y con respecto a las tres salidas reguladas (c, T, V), (iv) en $t < 3$ (transitorio) el controlador QLD FF-OF también supera a los otros dos controladores, pues ofrece una regulación sin desviación en el control de temperatura y volumen y una desviación similar que los otros dos controles en el offset de concentración y (v) el controlador QLD FF-OF presenta la menor desviación de tasa de reacción tanto en la parte transitoria como en la asintótica comparado con los otros dos controladores. De tal modo que el control QLD FF-OF tiene mejor comportamiento asintótico y transitorio que los controles NLP FF-SF y FF-OF+EKF a pesar de que su estructura es más simple. Se puede observar que a diferencia del caso monótono, donde la concentración de entrada c_e se estima gracias a que es entrada observable, en el caso no monótono el cambio en la concentración de entrada (en $t = 3$) tiene mayor repercusión en el estimado de concentración y por ende en el tamaño del “offset” de regulación.

En la Tabla 5.2 se muestran para los controladores NLP FF-SF, FF-OF+EKF y QLD FF-OF (caso monótono y no monótono) las señales y requerimientos del modelo matemático que se necesitan para su implementación, de tal modo que se puede comparar la dependencia de entradas exógenas, funciones y parámetros del modelo matemático de los controles mencionados.

La Tabla 5.2 muestra claramente como el control propuesto requiere un

	Controles			Estados				Entradas exógenas				
	q	q_e	q_j	c	T	T_j	V	T_e	\dot{T}_e	T_{je}	c_e	\dot{c}_e
NLP FF-SF fun: $\gamma, \pi, \rho, \rho_T, \rho_c, \gamma_T, \gamma_c$ par: ϖ_j, ϖ, Δ												
q		•		•	•		•					
q_e				•	•		•				•	
q_j	•			•	•	•	•	•	•	•	•	•
FF-OF+EKF fun: $\gamma, \pi, \rho, \rho_T, \rho_c, \gamma_T, \gamma_c$ par: ϖ_j, ϖ, Δ												
q		•			•	•	•	•			•	
q_e					•	•	•	•			•	
q_j	•	•			•	•	•	•		•	•	
QLD FF-OF mono fun: ρ par: $\varpi, \varpi_j, \Delta, a_c, a_T, a_j, a_V$												
q							•					
q_e			•		•	•	•	•		•		
q_j					•	•						
QLD FF-OF non mono par: $\varpi, \varpi_j, \Delta, a_T, a_j, a_V$												
q							•					
q_e			•		•	•	•	•		•	•	
q_j					•	•						

Tabla 5.2: Comparación de las señales, funciones y parámetros necesarios por los algoritmos de control

menor conocimiento de las señales, parámetros y funciones del reactor que los controles NLP FF-SF y FF-OF+EKF. Al comparar las dependencias entre el control propuesto para el caso monótono y no monótono, se puede observar que el primero requiere el conocimiento de la cinética de reacción, la concentración de entrada y el parámetro estático de la dinámica de concentración $(\rho(c, T), c_e, a_c)$ mientras que el segundo no. Esta mayor dependencia del modelo matemático del control en el caso monótono, que en principio puede interpretarse como una desventaja, se traduce, en combinación con la propiedad de observabilidad, en un mejor desempeño y un menor error en estado permanente que en el caso no monótono. Esta constituye la principal diferencia del desempeño del controlador del esquema propuesto con respecto al tipo de cinética que presente el reactor.

5.6.6 Comportamiento nominal y robusto sin el lazo de concentración

En esta sección se muestra la comparación de las respuestas del control propuesto (5.59)-(5.61) con los lazos de concentración, temperatura y volumen VS los lazos de temperatura y volumen sólo. El objetivo es determinar el efecto del lazo de control de concentración en la respuesta del reactor. En la Figura se muestra el comportamiento nominal y en la Figura el comportamiento robusto. El comportamiento nominal muestra que: (i) la presencia del lazo de concentración no es indispensable, ya que aún sin él se logra la estabilización del reactor, y (ii) el lazo de concentración mejora el tiempo de asentamiento, reduce el sobrepaso y la oscilación de la respuesta. El comportamiento ante condiciones realistas muestra que el lazo de concentración: (i) tampoco es necesario para la estabilización del reactor, (ii) presenta un mayor error en estado permanente ante errores paramétricos y (iii) reduce la sensibilidad de la respuesta ante cambios en la concentración de entrada, es decir tiene mayor robustez ante cambios en esta entrada exógena. El análisis de la dinámica isotérmica y las simulaciones anteriores explican porque un reactor CSTR con dinámica isotérmica monoestable en la práctica industrial puede ser estabilizado sólo utilizando los lazos de control de temperatura y volumen sin importar que la cinética sea monótona o no monótona. La condición necesaria para lograr la estabilización del reactor es que la dinámica isotérmica sea monoestable. Una vez estabilizado el reactor suele operarse con un esquema de control supervisorio de concentración, haciendo correcciones del

valor deseado a partir de mediciones esporádicas fuera de línea. Por otro lado, los resultados muestran que incluir un lazo de control en línea mejora la respuesta transitoria y ofrece mayor robustez ante cambios en la concentración de entrada a cambio de un error en estado permanente dependiente del tamaño de los errores paramétricos.

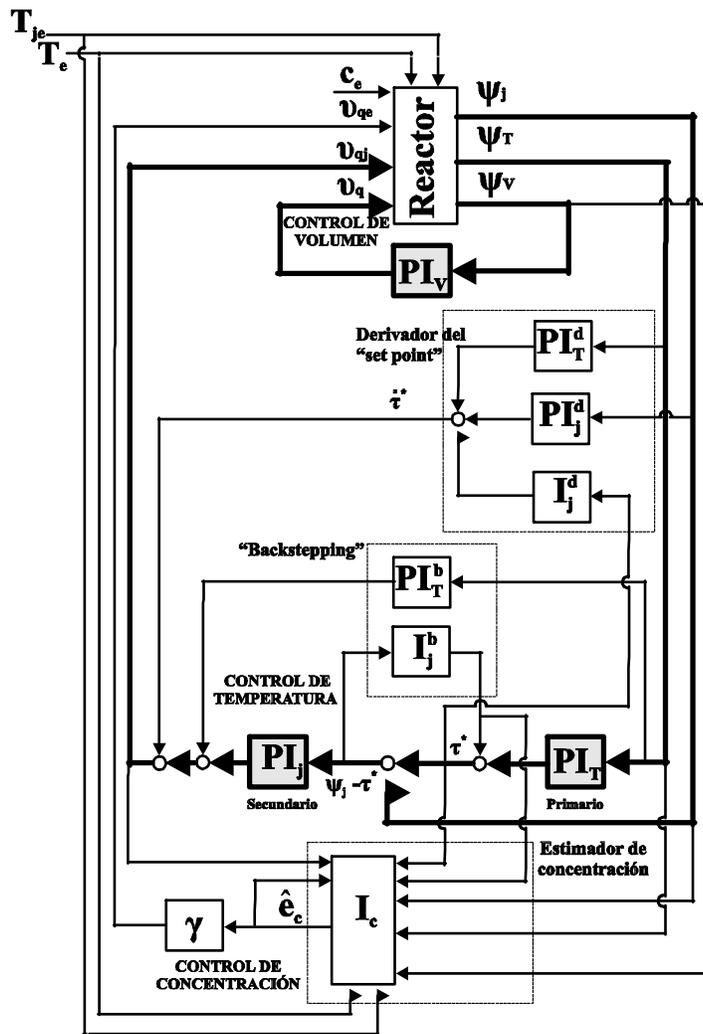


Figura 5.1: Diagrama de bloques del control propuesto con elementos convencionales PI e I

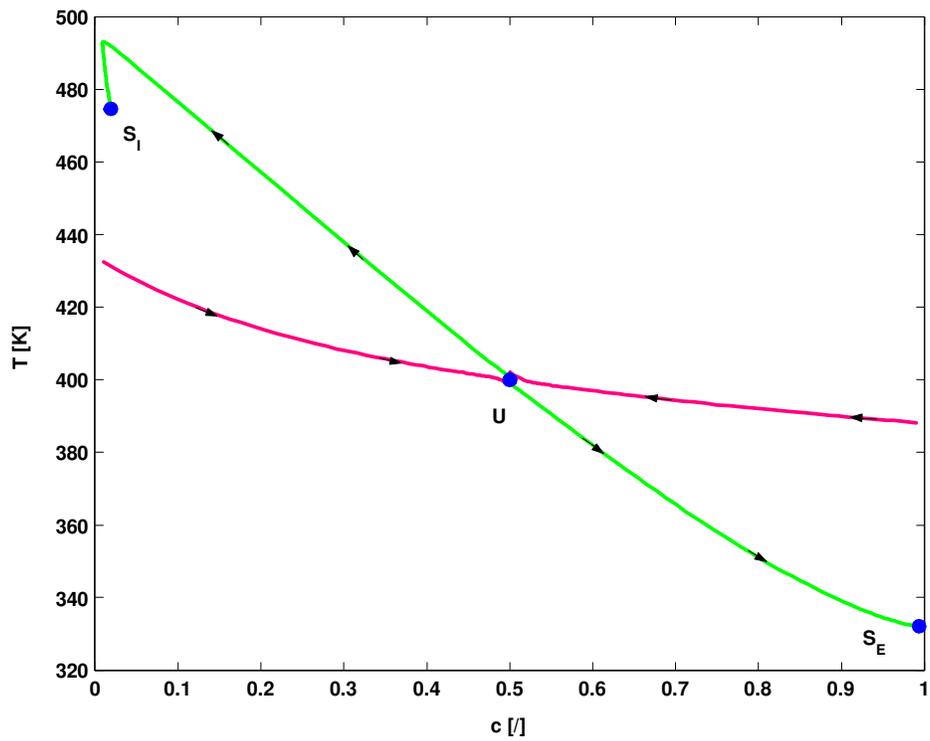


Figura 5.2: Proyección en el plano $c - T$ del plano de fase del reactor con el control MB (4.148).

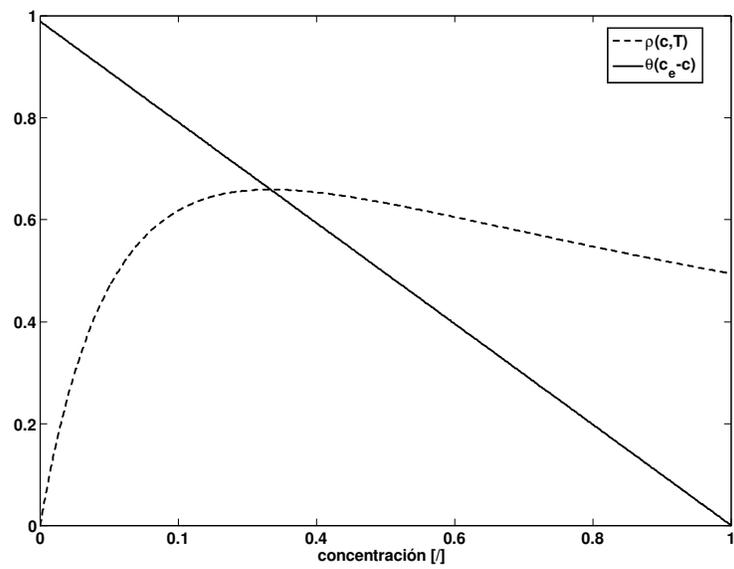


Figura 5.3: Solución gráfica de la dinámica isotérmica del reactor de prueba con cinética no monótona.

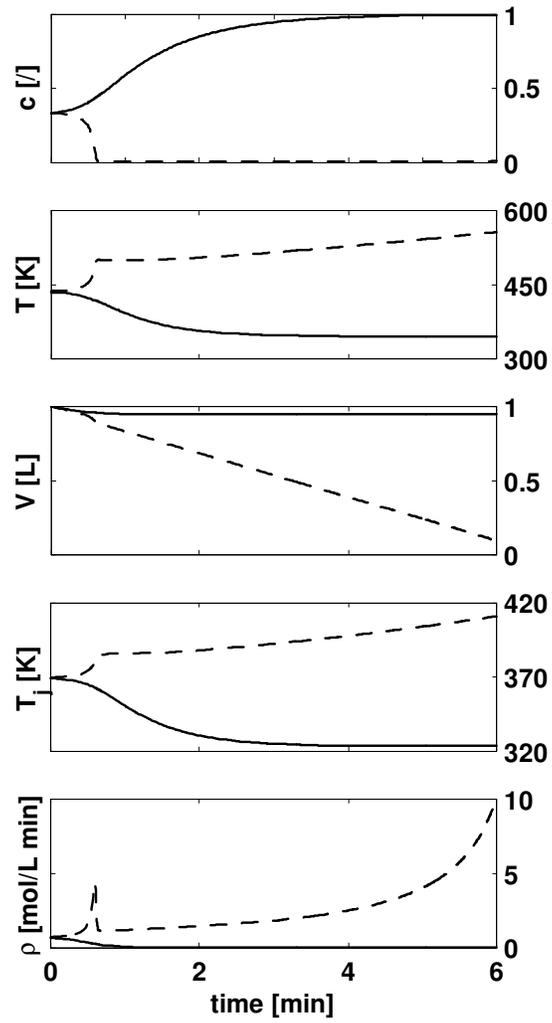


Figura 5.4: Respuesta del reactor con el control ideal MB y condiciones iniciales: x_{0I} (-) y x_{0E} (-)

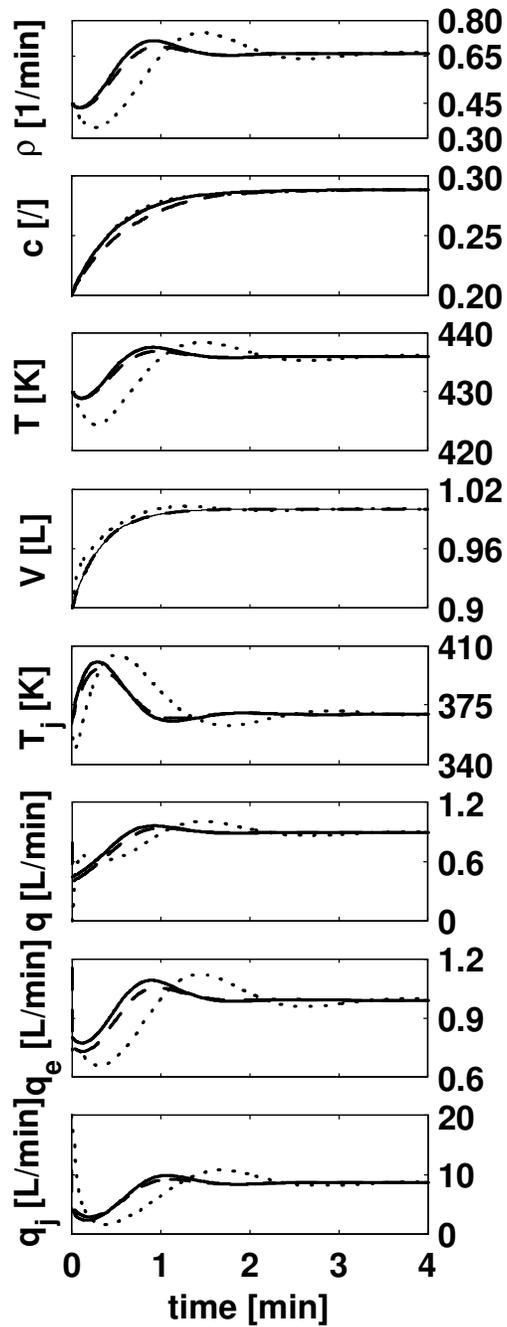


Figura 5.5: Respuesta a lazo cerrado del reactor con los controles NL FF-SF (3.31)-(3.35)(-), FF-OF+EKF (4.17)-(4.29)(- -) y QLD FF-OF (5.59)-(5.61)(\cdots)

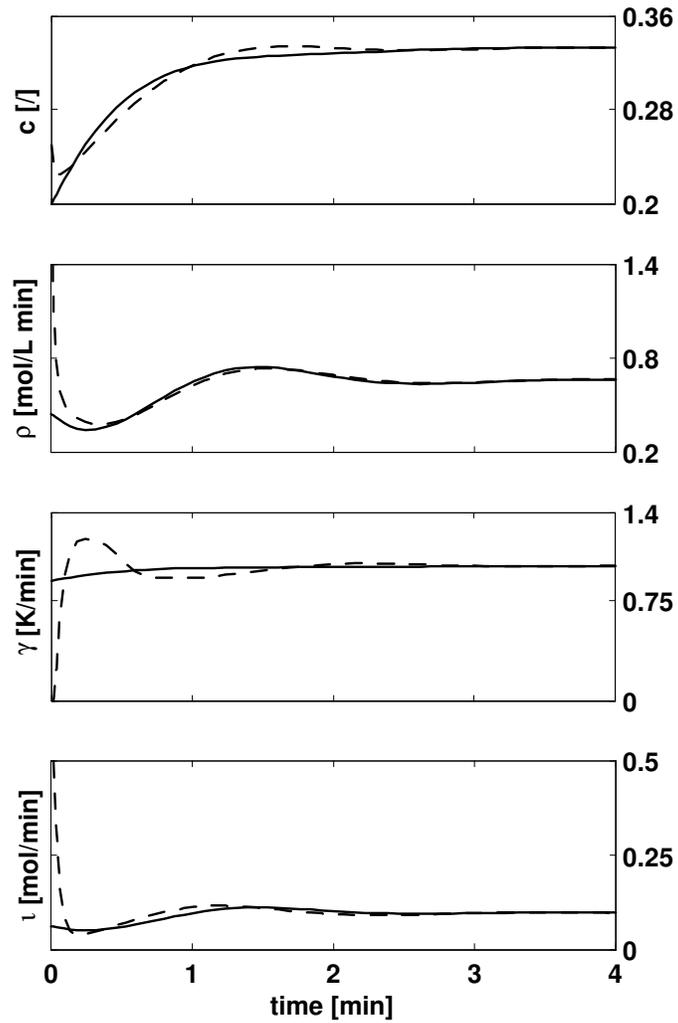


Figura 5.6: Señales actuales (—) y estimadas (- -) de concentración, cinética de reacción, tasa de intercambio de calor y factor de contracción con el control QLD FF-OF (5.59)-(5.61)

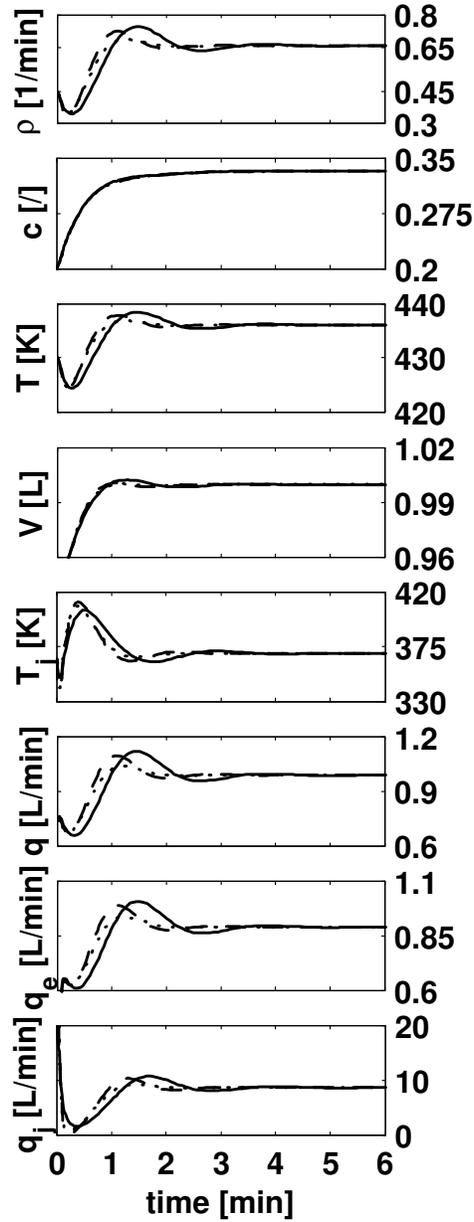


Figura 5.7: Respuesta a lazo cerrado con el control QLD FF-OF (5.59)-(5.61) con diferentes pares de ganancias para el control en cascada de temperatura $(k_T, k_j) = (3, 12)(-)$, $(6, 6)(- -)$ y $(12, 12)(\cdot \cdot \cdot)$.

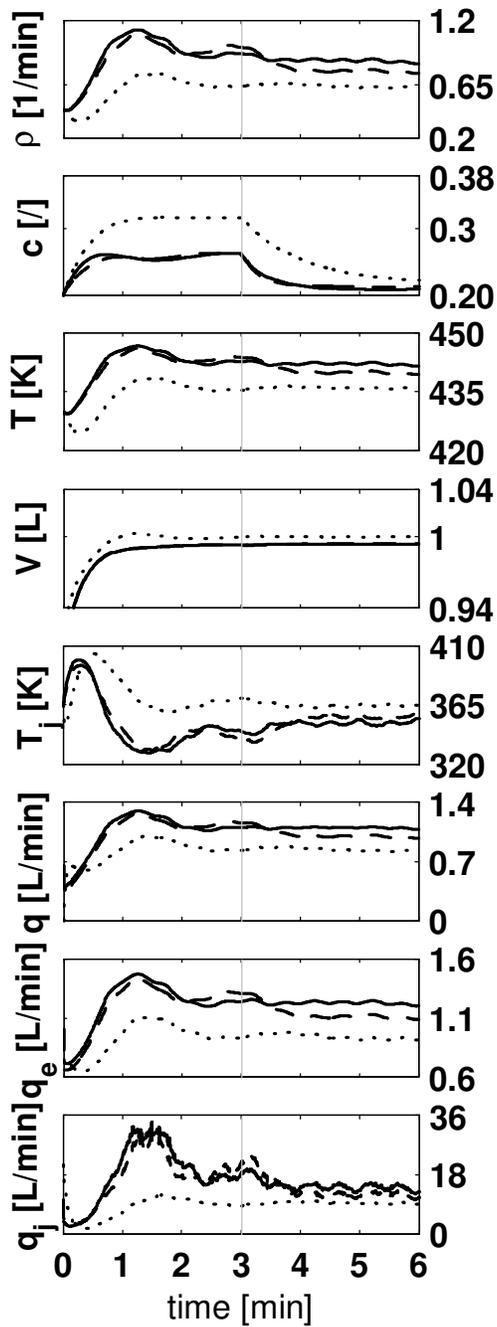


Figura 5.8: Respuesta robusta a lazo cerrado con los controles NL FF-SF (3.31)-(3.35)(-), FF-OF+EKF (4.17)-(4.29) (- -) y QLD FF-OF (5.59)-(5.61) (⋯)

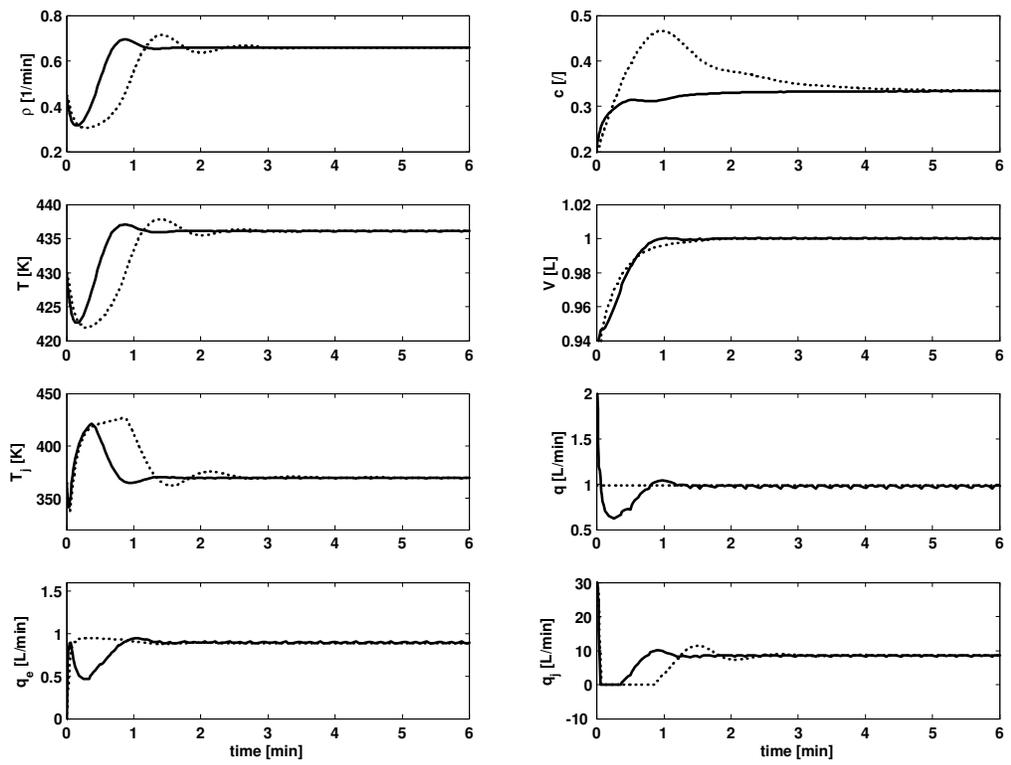


Figura 5.9: Respuesta nominal a lazo cerrado del reactor con el control QLD FF-OF (5.59)-(5.61) (-), y con $q_e = \bar{q}_e$ (\cdots)

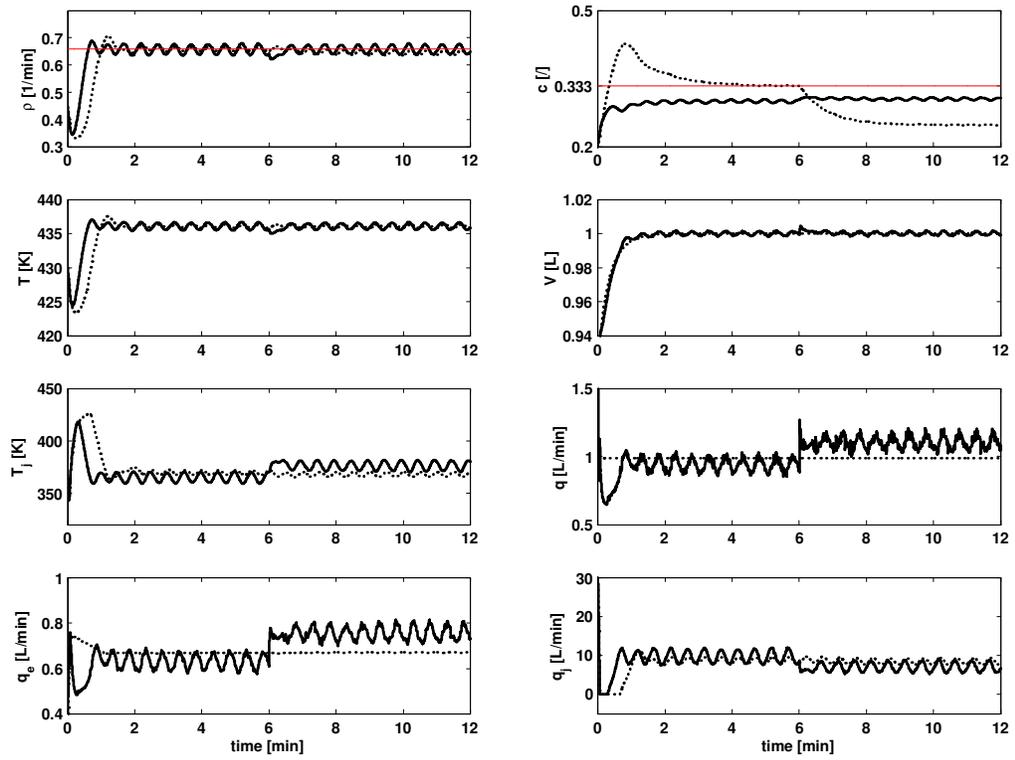


Figura 5.10: Respuesta robusta a lazo cerrado del reactor con el control QLD FF-OF (5.59)-(5.61) (-), y con $q_e = \bar{q}_e$ (\cdots)

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo se aborda el problema de control robusto de reactores exotérmicos de tanque agitado y operación continua con reacción única e irreversible. Se diseña un control constructivo robusto por retroalimentación de mediciones (de volumen y temperatura) para reactores con cinética monótona y no monótona con respecto a concentración, manipulando los flujos del refrigerante, de entrada y de salida del reactor para la regulación de la temperatura, el volumen y la concentración del reactor.

La aplicación de una técnica constructiva permite determinar las condiciones de solubilidad con significado físico y proponer un modelo dinámico cuasi-lineal (quasi linear dynamic QLD), confeccionado a partir de las propiedades de grado relativo, pasividad y observabilidad/detectabilidad (en el caso monótono y no monótono respectivamente) del modelo matemático del sistema.

Este modelo matemático se utiliza como base de diseño de un controlador-observador prealimentado (FF) y retroalimentado por salida (OF) que: (i) recupera el comportamiento de un controlador prealimentado y retroalimentado por estado (FF-SF) robusto y no lineal, limitado sólo por la convergencia del observador, (ii) es considerablemente más simple e independiente del modelo que el control basado en un EKF o un control geométrico, (iii) constituye una mejora de los esquemas lineales y descentralizados de control PI utilizados en reactores industriales, (iv) está formado por la combinación de componentes lineales Proporcional-Integral (PI) e Integral (I) para el control de volumen y temperatura y un componente de estimación-control de concentración, (v) tiene un criterio de estabilidad no local a lazo cerrado acoplado con guías de sintonización convencionales, (vi) tiene un diseño sis-

temático, características de linealidad, descentralización y dependencia mínima del modelo y (vii) permite estimar tres o cuatro señales (dependiendo el tipo de cinética) sin interferir en el funcionamiento del control y establecer el monitoreo del producto o del propio proceso.

La mejora del control propuesto con respecto a los esquemas de control utilizados en reactores industriales consiste en una serie de componentes adicionales. Estos componentes adicionales logran: (i) un esquema de control de temperatura en cascada que no requiere de separación dinámica para su funcionamiento, (ii) protección contra el “windup” en los lazos de volumen y temperatura, y (iii) un componente de estimación-control de concentración que explota la información contenida en las acciones integrales del control de temperatura. Cabe señalar que estas mejoras no son triviales ni convencionales y sólo pueden explicarse utilizando las técnicas de control no lineal avanzado.

Por otro lado, la solución del problema de control utilizando la metodología de control constructivo permite: (i) identificar las condiciones de resolubilidad con significado físico, información que puede ser utilizada para el diseño mismo de los reactores, (ii) establecer una conexión formal entre las herramientas de control no lineal avanzado y control convencional de este tipo de reactores, (iii) mostrar las particularidades y limitaciones que han de tomarse en cuenta en el diseño y sintonización del esquema de control-estimación dependiendo del tipo de cinética de reacción y (iv) una explicación analítica que muestra porque funcionan correctamente los esquemas de control convencionales.

Las principales diferencias del esquema de control propuesto entre ambos tipos de cinéticas son: (i) una mayor dependencia del modelo matemático del control en el caso monótono, que se traduce, en combinación con la propiedad de observabilidad, en un mayor desempeño y un menor error en estado permanente que en el caso no monótono, (ii) la posibilidad de recuperar el valor de la concentración de entrada en el caso monótono, mientras que esto no es posible en el caso no monótono, (iii) la ventaja de poder aumentar la velocidad de convergencia del estimador de concentración en el caso monótono por sus fuertes propiedades de observabilidad, mientras que esto no es posible (al menos en la cercanía de un punto de máxima producción) en el caso no monótono debido a que este sólo es detectable, y (iv) la inclusión de un componente de control PI en el lazo de concentración en el caso monótono, mientras que en el caso no monótono sólo es posible incluir un componente I.

El control propuesto es probado en simulación numérica utilizando dos reactores inestables a lazo abierto, uno por cada tipo de cinética. Las simulaciones muestran que el control propuesto tiene un menor desempeño en la parte transitoria, pero un mejor desempeño en la parte asintótica, pues logra un mayor rechazo a perturbaciones que los controles NLP FF-SF y FF-OF+EKF aún en presencia de: (i) perturbaciones de entrada, (ii) errores y ruido de medición, y (iii) errores paramétricos. Además, se muestra claramente como el control propuesto requiere un menor conocimiento de las señales, parámetros y funciones del reactor en comparación con los controles NLP FF-SF y FF-OF+EKF.

El trabajo aquí presentado es un paso necesario para lograr que la metodología de diseño pueda ser generalizada a una clase más grande de reactores en particular y procesos químicos en general donde: (i) exista interconexión de sistemas pasivos y (ii) cinéticas de reacción de varios componentes.

Como trabajo futuro inmediato se encuentra la extrapolación de la metodología utilizada en este trabajo para: (i) el diseño de esquemas de control-estimación de reactores biológicos de operación continua, y (ii) reactores químicos y/o biológicos de parámetros no concentrados.

Bibliografía

- [1] Elnashaie, S., Abashar, M., The implication of non-monotonic kinetics on the design of catalytic reactors. Chem. Eng. Sc., Vol. 45, No. 9, p. 2964-2967, 1990.
- [2] Uppal, A., Ray, W.H. and Poore, A.B. On the Dynamic Behavior of Continuous Stirred Tank Reactors. Chem. Eng. Sci. Vol. 29, p. 967-985, 1974.
- [3] Shinskey, F.G. Process Control Systems, 3rd ed. Mc. Graw-Hill, New York, 1988.
- [4] Luyben, W.L. Process Modeling Simulation and Control for Chemical Engineerings, 2nd ed., Mc Graw-Hill, Singapore, 1990.
- [5] Gauthier, J.P., Hammouri, H. and Othman, S., A simple Observer for Nonlinear Systems Applications to Bioreactors, IEEE T. Automatic Control, Vol. 37, No. 6, 1992.
- [6] Antonelli, R. and Astolfi, A., Continuous stirred tank reactors: easy to stabilize?, Automatica, Vol. 39, p. 1817-1827, 2003.
- [7] Ogunnaike, B.A., and Wright, R.A., Industrial application of nonlinear control, Proceedings of the Fifth International Conference on Chemical Process control, A.I.Ch.E. Symposium series, Vol. 93, p. 46, 1997.
- [8] Farschman, C.A., Viswanath K.P. and Ydstie, B. E., Process systems and inventory control, AIChE J., Vol. 44, p. 1841-1857, 1998.
- [9] Gopaluni, R.B., Mizumoto, I. and Shah, S.L. A Robust Nonlinear Adaptive Backstepping Controller for a CSTR, Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 42, p. 4628-4644, 2003.

- [10] Wright, R.A. and Kravaris, C., Two degree of freedom output feedback controllers for nonlinear processes, *Chem. Eng. Sc.*, Vol. 60, p. 4323-4336, 2005.
- [11] Soroush, M. and Kravaris, C. Nonlinear Control of a Polymerization CSTR with Singular Characteristic Matrix, *AIChE J.*, Vol. 40, No. 6, p. 980-990, 1994.
- [12] Alvarez, J. and Gonzalez, P., Constructive control of continuous polymer reactors, *J. Process Control*, Vol. 17, No. 5, p. 463-476, 2007.
- [13] Dore, S.D., Perkins, J.D. and Kershenbaum, L.S., Application of geometric nonlinear control in the process industries-a case study, *Proceedings of the ADCHEM'94*, Kyoto, Japan, 1994
- [14] Cebuhar, W.A. and Constanza, V., Nonlinear control of CSTR's, *Chemical Engineering Science*, Vol. 44, p. 1147-1160, 1984.
- [15] Navneet, K. and Daoutidis, P., Stabilization of nonlinear processes with input constraints, *Comp. and Chem. Eng.*, Vol. 24, p. 9-21, 2000.
- [16] Alvarez, J. Output-feedback control of nonlinear plants, *AIChE Journal*, Vol. 39, No. 9, p. 2540-2554, 1996.
- [17] Lee, J.H. and Ricker, N.L. Extended Kalman filter based nonlinear model predictive control, *Proceedings of the Am. Control Conf.* p.1895-1899, 1993.
- [18] Sung-Mo, A., Myung-June, P. and Hyun-Ku, R. Extended Kalman Filter-Based Nonlinear Model Predictive control for a continuous MMA Polymerization reactor, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 38, No. 10, p. 3942-3949, 1999.
- [19] Aris, R. and Amundson, N.R. An analysis of chemical reactor stability and control, *Chemical Eng. Sc.*, Vol. 7, p. 121-126, 1958.
- [20] Smets, I., Bastin, G. and J. Van Impe, Feedback Stabilization of Fed-Batch Bioreactors: Non-Monotonic Growth Kinetics., *Biotechnology Progress*, Vol. 18, No. 5, p. 1116-1125, 2002.
- [21] Aris, R. *Elementary Chemical Reactor Analysis*, P. H., 1969.

- [22] Figueroa, J., Biagiola, S. and Álvarez, J. Constructive MPC of a class of exothermic CSTR's, Proceedings of the 8th DYCOPS IFAC, Cancun, Mexico, 2007.
- [23] Lee, P.L. and Sullivan, G.R. Generic Model Control, *Comput. Chem. Eng.*, Vol. 12, No. 6, p.573-580, 1988.
- [24] Kazantzis N. and Kravaris, C., Nonlinear observer design for process monitoring, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 39, No. 2, p. 408-419, 2000.
- [25] Edouard, D., Dufour, P. and Hammouri, H. Observer based multivariable control of a catalytic reverse flow reactor: comparison between LQR and MPC approaches, *Comp. & Chem. Eng.*, Vol. 29, No. 4, p. 851-865, 2005.
- [26] Viel, F., Jadot, F. and Bastin, G., Global Stabilization of Exothermic Chemical Reactors under Input Constraints, *Automatica*, Vol. 33, No. 8, p. 1437-1448, 1997.
- [27] Biagiola, S.I. and Figueroa, J.L. Application of state estimation based NMPC to an unstable nonlinear Process, *Chem. Eng. Sc.* Vol. 59, p. 4601-4612, 2004.
- [28] Lopez, T. and Alvarez, J. On the effect of the estimation structure in the functioning of a nonlinear copolymer reactor estimator, *J. of Process Control*, Vol. 14, p. 99-109, 2004
- [29] Alvarez-Ramirez, J., Suarez, R. and Femat, R. Control of continuous-stirred tank reactors: stabilization with unknown reaction rates, *Chem. Eng. Sc.*, Vol. 51, No. 17, p. 4183-4188, 1996
- [30] Alvarez-Ramirez, J., Alvarez, J. and Morales, A. An adaptive cascade control for a class of chemical reactors. I. *J. Adaptive Contr. And Sig. Processing*, Vol. 16, p. 681-701, 2002
- [31] Gonzalez, P. and Alvarez, J. Combined PI-inventory control of solution homopolymerization reactors, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 44, p. 7147-7163, 2005
- [32] Flory, P.J., *Principles of Polymer Chemistry*, Cornell university Press, New York, 1953.

- [33] Carberry, J.J., Chemical and Catalytic Reaction Engineering, McGraw-Hill, New York, 1976.
- [34] Bailey, J.E. and Ollis, D.F., Biochemical Engineering Fundamentals, McGraw-Hill, New York, 1977.
- [35] Moreno, J.A.; Dochain, D., Global observability and detectability analysis of uncertain reaction systems and observer design, International Journal of Control, Vol.81, No.7, p. 1062-70, 2008.
- [36] Ogunnaike, B.A. and Ray, W.H., Process Dynamics, Modeling and Control, Oxford University press, New York, 1994.
- [37] Schaum, A., Moreno, J.A., Diaz-Salgado, J. and Alvarez, J. Dissipativity-based Observer and feedback control design for class of Chemicals reactors. J. of Process Control, Vol. 18, p. 896-905, 2008.
- [38] Schaum A., Alvarez J. and Lopez-Arenas T. Saturated output feedback control for a class of continuous fermenters, Proceedings of the IFAC 18th World Congress, Milan, Italy 2011.
- [39] Betancur, M.J., Moreno, J.A., Moreno-Andrade, I., Buitrón G., Practical optimal control of fed-batch bioreactors for the waste water treatment, International Journal of Robust and Nonlinear Control, Vol. 16 No. 3, p. 173-190, 2005.
- [40] Sepulchre, R., Jankovic, M. and Kokotovich, P. Constructive Nonlinear Control, Springer-Verlag, NY, 1997.
- [41] Khalil, H., Nonlinear Systems. Prentice hall, N.J., 1996.
- [42] Hermann, R., Krener, A., Nonlinear Controlability and Observability, IEEE Transactions on Automatic Control, Vol. AC-22, No. 5, p. 728-740, 1997
- [43] Álvarez, J. and López, T., Robust Dynamic State estimation of Nonlinear Plants. AIChE Journal, Vol. 45, No. 1, p. 107-123, 1999.
- [44] Krener, A.J., Respondek, W., Nonlinear Observers with linearizable error dynamics, SIAM Journal of Control and Optimization, Vol. 23, p. 197-216, 1985.

- [45] J. Álvarez, et. al. Robust geometric Nonlinear Control of Process Systems, Proceedings of the ADCHEM, IFAC, 2000.
- [46] Allgöwer, F. and Zheng, A. (Eds.), Nonlinear Model Predictive Control, Birkhäuser, Germany, 2000.
- [47] Alvarez, J., Zaldo, F. and Oaxaca, G. Towards a Joint Process and Control Design Framework for Batch Processes: Application to Semi-batch Polymer Reactors, in: P. Seferlis, M.C. Georgiadis, (Eds.) The Integration of Process Design and Control, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2004.
- [48] Isidori, A., Nonlinear Control System, Springer, N. Y., 1995.
- [49] Isidori, A. Nonlinear Control Systems II, Springer-Verlag, London, 1999.
- [50] Castellanos-Sahagun, J. Alvarez-Ramirez, J. Alvarez, Two-Point Temperature Control Structure and Algorithm Design for Binary Distillation Columns, Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 44, p. 142-152, 2005.
- [51] Apostol, T. M., Calculus, John Wiley & Sons, New York, 1969.
- [52] Sontag, E.D. The ISS philosophy as an unifying framework for stability-like behavior, in: A. Isidori, F. Lamnabhi-Lagarrigue, W. Respondek, (Eds.), Nonlinear Control in the year 2000, Lecture Notes in Control and Information Sciences, Vol. 2, Springer-Verlag, Berlin, p. 443-468, 2000.
- [53] Moreno, J.A. Existence of unknown input observers and feedback passivity for linear systems, Proceedings of the IEEE Conf. Decision Control, Vol. 4, p. 3366-3371, 2001.
- [54] Krstic, M., Kanellakopoulos, I. and Kokotovic, P. V. Nonlinear and Adaptive Control Design, Wiley, 1995.
- [55] Stefani, R.T., Savant Jr. C.J., Shahian, B. and Hostetter, G.H. Design of Feedback Control Systems, third ed., Saunders College Publishing, Florida, 1994.
- [56] Freeman, R. and Kokotovich, P. Robust Nonlinear Control Design: State-Space and Lyapunov Techniques, Birkhäuser, Boston, 1996.

- [57] Alvarez, J. and Fernandez, C. Geometric estimation of nonlinear process systems, *J. of Process Control*, Vol. 19, p. 247-260, 2009.
- [58] Gelb, A. *Applied Optimal Estimation*, M.I.T. Press, Cambridge, 1978.
- [59] Reif, K., Sonnemann, F. and Unbehauen, R. An EKF-based nonlinear observer with a prescribed degree of stability, *Automatica* Vol. 34, p. 1119-1123, 1998.
- [60] Leu, G. and Baratti, R. An extended Kalman filtering approach with a criterion to set its tuning parameters; application to a catalytic reactor, *Computers and Chem. Eng.*, Vol. 23, p. 1839-1849, 2000.
- [61] Álvarez-Ramirez, J. and Álvarez, J., Linear PI control of batch exothermic reactors with temperature measurement, *Int. J. Robust Nonlinear Control*, Vol. 16, p. 113-131, 2006.
- [62] Baratti, R., Alvarez, J. and Morbidelli, J. M. Design and experimental verification of a nonlinear catalytic reactor estimator, *Chemical Engineering Science* Vol. 48, No. 14, p. 2573-2585, 1993.
- [63] López, T. et. al., State estimation in a Catalytic Reactor via a Constructive Approach., *Proceedings of the 15th World Congress, IFAC*, 2002
- [64] Lapidus, L., Amundson, N. Editors, *Chemical Reactor Theory*, Prentice Hall, New Jersey, 1977.
- [65] Gonzalez, P. and Alvarez, J., Constructive Control of Continuous Polymer Reactors., *J. of Process Control*, Vol. 17, p. 463-476, 2007.
- [66] Leonard, D.; Ben Youssef, C.; Destruhaut, C.; Lindley, N.D.; Queinnec, I. Phenol degradation by *Ralstonia eutropha*: colorimetric determination of 2-hydroxymuconate semialdehyde accumulation to control feed strategy in fed-batch fermentations. *Biotechnol. Bioeng.* Vol. 65, p. 407-415, 1999.
- [67] Valentinotti, S.; Holberg, U.; Cannizzaro, C.; Bonvin, D. Modeling for control of fed-batch fermentors. In *Preprints of ADCHEM 2000, IFAC International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes*; Biegler, L., Brambila, A., Scali, C., Marchetti, G., Eds.; Pisa, Vol. 1, p. 491-496, 2000.

- [68] Chen, L.; Bastin, G.; Van Breusegem, V. A case study of adaptive nonlinear regulation of fed-batch biological reactors. *Automatica*, Vol. 31, p. 55-65, 1995.
- [69] Buckley, P.S. *Techniques of Process Control*, Wiley, New York, 1964.
- [70] Kravaris, C. and Kantor, J.C. Geometric methods for nonlinear process control. 2. Controller synthesis, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 29 No. 12, p. 2310-2323, 1990.
- [71] Georgakis, C. On the use of extensive variables in process dynamics and control *Chemical Engineering Science*, Vol. 41, No. 6, p. 1471-1484, 1986.
- [72] Bondy, F. and Lippa, S. Heat transfer in agitated vessels *Chemical Engineer* Vol. 4, p. 62-71, 1983.
- [73] Rawlings, J.B. Tutorial overview of Model Predictive Control *IEEE Control Systems Magazine*, p. 38-52, 2000.
- [74] Dochain, D., Perrier, M. And Ydstie, B. E. Asymptotic Observers for Stirred Tank Reactors, *Chem. E. Science*, Vol. 47 (14/15), p. 4167-4177, 1992.
- [75] Diaz-Salgado, J., Schaum, A., Moreno, J.A., Alvarez, J., Interlaced estimator control design for continuous exothermic reactors with non-monotonic kinetics, *Proceedings of the 8th International Symposium on Dynamics and Control Process Systems, IFAC, Mexico, 2007.*
- [76] Diaz-Salgado, J., Moreno, J.A., Alvarez, J., Control of continuous reactors with non-monotonic reaction rate, *Proceedings of the International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes, IFAC, Brasil, 2006.*
- [77] Diaz-Salgado, J., Estudio del problema de estimación y control de reactores químicos, *Tesis de Maestría, UNAM, México, 2005.*
- [78] Schaum, A., Moreno, J.A., Vargas. A. Global Observability and Detectability Analysis for a Class of Nonlinear Models of Biological Processes with Bad Inputs, *Proceedings of the 2nd International Conference on Electrical and Electronics Engineering, Mexico, 2005.*

- [79] Dimitratos, J., Georgakis, C., El-Aasser, M.S. and Klein, A., Dynamic modeling and state estimation for emulsion copolymerization reactor, *Comp. Chem. Eng.*, Vol. 13, p. 21-33, 1989.
- [80] Brammer, K. and Siffing, G. Kalman-Bucy filters, Artech House, Massachusetts, 1989
- [81] Nijmeijer, H., Van der Shaft, A., *Nonlinear Dynamical Control Systems*, Springer-Verlag, New York, 1990.

Apéndice A

Balance de Materia

El balance de materia esta dado por

$$\dot{m} = q_e \rho_1 - q \rho_m$$

la densidad de la mezcla ρ_m se puede expresar en términos de las fracciones másicas del reactante y el producto w_1 y w_2 respectivamente

$$\begin{aligned}\rho_m &= \frac{\rho_1}{w_1} + \frac{\rho_2}{w_2} \\ \rho_m &= \frac{\rho_1 \rho_2}{w_1 \rho_2 + w_2 \rho_1}\end{aligned}$$

y como $w_1 + w_2 = 1$

$$\begin{aligned}\rho_m &= \frac{\rho_1 \rho_2}{w_1 \rho_2 + (1 - w_1) \rho_1} \\ \rho_m &= \frac{\rho_1 \rho_2}{w_1 \rho_2 + \rho_1 - w_1 \rho_1}\end{aligned}$$

se define un factor de contracción ε como

$$\varepsilon = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1}$$

la densidad del producto ρ_2 se puede escribir como:

$$\rho_2 = (1 + \varepsilon) \rho_1$$

Por otro lado se puede escribir la fracción másica w_1 en función de la concentración:

$$w_1 = c \frac{\rho_1}{\rho_m}$$

Sustituyendo ambos resultados, la densidad ρ_m se puede expresar como:

$$\begin{aligned} \rho_m &= \frac{\rho_1 (1 + \varepsilon) \rho_1}{c \frac{\rho_1}{\rho_m} (1 + \varepsilon) \rho_1 + \rho_1 - c \frac{\rho_1}{\rho_m} \rho_1} \\ \rho_m &= \frac{(1 + \varepsilon) \rho_1}{\varepsilon c \frac{\rho_1}{\rho_m} + 1} \\ \rho_m \left(\varepsilon c \frac{\rho_1}{\rho_m} + 1 \right) &= (1 + \varepsilon) \rho_1 \\ \varepsilon c \rho_1 + \rho_m &= (1 + \varepsilon) \rho_1 \\ \rho_m &= (1 + \varepsilon) \rho_1 - \varepsilon c \rho_1 \\ \rho_m &= \rho_1 [1 + \varepsilon (1 - c)] \end{aligned}$$

sustituyendo el el balance de materia

$$\dot{m} = q_e \rho_1 - q \rho_1 [1 + \varepsilon (1 - c)]$$

Por otro lado a partir de la definición de volumen $V = \frac{m}{\rho_m}$ la derivada temporal se calcula como

$$\begin{aligned} \frac{d(V \rho_m)}{dt} &= \frac{dm}{dt} \\ \dot{V} \rho_m + V \dot{\rho}_m &= \dot{m} \end{aligned}$$

la derivada de la densidad de la mezcla es:

$$\dot{\rho}_m = -\rho_1 \varepsilon \dot{c}$$

y sustituyendo la derivada de la masa se obtiene

$$\begin{aligned}
\dot{V}\rho_m - V\rho_1\varepsilon\dot{c} &= q_e\rho_e - q\rho_1 [1 + \varepsilon(1 - c)] \\
\dot{V} &= \frac{q_e\rho_e - q\rho_1 [1 + \varepsilon(1 - c)] + V\rho_1\varepsilon f_c}{\rho_m} \\
\dot{V} &= \frac{q_e\rho_1 - q\rho_1 [1 + \varepsilon(1 - c)] + V\rho_1\varepsilon f_c}{\rho_1 [1 + \varepsilon(1 - c)]} \\
\dot{V} &= \frac{q_e - q [1 + \varepsilon(1 - c)] + V\varepsilon f_c}{1 + \varepsilon(1 - c)} \\
\dot{V} &= \frac{q_e}{1 + \varepsilon(1 - c)} - q + \frac{V\varepsilon f_c}{1 + \varepsilon(1 - c)} \\
\dot{V} &= q_e - q + q_e \left(\frac{1}{1 + \varepsilon(1 - c)} - 1 \right) + \frac{V\varepsilon f_c}{1 + \varepsilon(1 - c)} \\
\dot{V} &= q_e - q + q_e \left(\frac{1}{1 + \varepsilon(1 - c)} - \frac{1 + \varepsilon(1 - c)}{1 + \varepsilon(1 - c)} \right) + \frac{V\varepsilon f_c}{1 + \varepsilon(1 - c)} \\
\dot{V} &= q_e - q - q_e \left(\frac{\varepsilon(1 - c)}{1 + \varepsilon(1 - c)} \right) + \frac{V\varepsilon f_c}{1 + \varepsilon(1 - c)} \\
\dot{V} &= q_e - q - [q_e(1 - c) - Vf_c] \left(\frac{\varepsilon}{1 + \varepsilon(1 - c)} \right)
\end{aligned}$$

finalmente se define la tasa de contracción volumétrica π como:

$$\pi = [q_e(1 - c) - Vf_c(c, T, V)] \left(\frac{\varepsilon}{1 + \varepsilon(1 - c)} \right)$$

lo que da como resultado

$$\dot{V} = q_e - q - \pi$$

Apéndice B

Observador de orden reducido

Los detalles de diseño se encuentran en [31] [55]. Considere el siguiente modelo dinámico de primer orden:

$$\dot{e} = av + bd + \delta \quad (\text{B.1})$$

$$\dot{\delta} \approx 0 \quad (\text{B.2})$$

$$\psi = e \quad (\text{B.3})$$

donde: e es el estado, v es la entrada de control, d es una entrada exógena medida, δ es una entrada desconocida, ψ es la salida medida, y a y b son constantes. Además $\dim(\psi, e, d, \delta) = (1, 1, 1, 1)$. Suponga que la medición en realidad es la derivada de la salida, es decir $\dot{\psi}$. Diseñe un observador para la entrada desconocida δ , con una ganancia ω tal que haga que se cumpla (B.2)

$$\dot{\hat{\delta}} = \omega(\dot{\psi} - \dot{\hat{\psi}}) \quad (\text{B.4})$$

donde: $\dot{\psi} = av + bd + \delta$, y $\dot{\hat{\psi}} = av + bd + \hat{\delta}$, sustituyendo en (B.4)

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\delta}} &= \omega\dot{\psi} - \omega(av + bd + \hat{\delta}) \\ \dot{\hat{\delta}} - \omega\dot{\psi} &= -\omega av - \omega bd - \omega\hat{\delta} \end{aligned}$$

sumando y restando $\omega^2\psi$ en el lado derecho de la igualdad

$$\dot{\hat{\delta}} - \omega\dot{\psi} = \omega^2\psi - \omega av - \omega bd - \omega\hat{\delta} - \omega^2\psi \quad (\text{B.5})$$

$$\dot{\hat{\delta}} - \omega\dot{\psi} = -\omega(\hat{\delta} - \omega\psi) + \omega^2\psi - \omega av - \omega bd \quad (\text{B.6})$$

defina una variable auxiliar χ como: $\chi = \hat{\delta} - \omega\psi$ y su derivada

$$\dot{\chi} = \dot{\hat{\delta}} - \omega\dot{\psi}$$

y sustituya en (B.6)

$$\dot{\chi} = -\omega\chi + \omega(\omega\psi - av - bd), \quad \chi(0) = \hat{\delta}_0 - \omega\psi_0$$

resuelva esta ecuación diferencial para χ y utilizando la medición ψ , el estimado de δ es

$$\hat{\delta} = \chi + \omega\psi$$

Apéndice C

Dinámica de error a lazo cerrado: caso monótono

Para determinar la dinámica a lazo cerrado se utiliza el modelo QLD del reactor

$$\dot{V} = -a_V q + b_V, \quad y_V = z_V = V \quad (\text{C.1})$$

$$\dot{T} = a_T T_j + b_T, \quad y_T = z_T = T \quad (\text{C.2})$$

$$\dot{T}_j = -a_j q_j + b_j, \quad y_j = T_j \quad (\text{C.3})$$

$$\dot{c} = a_c q_e + b_c, \quad y_c = \sigma(y_T, y_j, y_V, b_T, b_j, q_e, q_j, T_e, T_{je}) \quad (\text{C.4})$$

y el control propuesto en lazo cerrado *QLD FF-OF* en función de los valores estimados de las cargas \hat{b} :

$$q_e = - \left[\frac{k_c (\hat{y}_c - \bar{c}) + \hat{b}_c}{a_c} \right] \quad (\text{C.5})$$

$$q = \frac{k_V (y_V - \bar{V}) + \hat{b}_V}{a_V} \quad (\text{C.6})$$

$$T_j^* = - \left[\frac{k_T (y_T - \bar{T}) + \hat{b}_T}{a_T} \right] \quad (\text{C.7})$$

$$q_j = \frac{k_j (y_j - T_j^*) + a_T (y_T - \bar{T}) + \hat{b}_j - \dot{T}_j^*}{a_j} \quad (\text{C.8})$$

$$\dot{T}_j^* = - \left[\frac{k_T (a_T y_j + \hat{b}_T)}{a_T} \right] \quad (\text{C.9})$$

$$\hat{y}_c = \sigma(y_T, y_j, y_V, \hat{b}_T, \hat{b}_j, q_e, q_j, T_e, T_{je}) \quad (\text{C.10})$$

Además, se utilizan: (i) los errores de regulación

$$\begin{aligned} e_V &= V - \bar{V} \\ e_T &= T - \bar{T} \\ e_j^* &= T_j - T_j^* \\ e_c &= c - \bar{c} \end{aligned}$$

y (ii) los vectores de error de regulación, salidas y salidas deseadas

$$e = [e_V, e_T, e_j^*, e_c]^T \quad (\text{C.11})$$

$$e_y = [e_V, e_T, e_j^*]^T \quad (\text{C.12})$$

$$y = [y_V, y_T, y_j]^T \quad (\text{C.13})$$

$$\bar{y} = [\bar{V}, \bar{T}, T_j^*]^T \quad (\text{C.14})$$

$$e_y = y + \bar{y} \quad (\text{C.15})$$

Para evitar tener términos constantes en las ecuaciones dinámicas de error se considera que:

$$\begin{aligned}
e_y &= y \\
e_V &= y_V = V \\
e_c &= y_c = c \\
e_T &= y_T = T
\end{aligned}$$

Se definen los errores de estimación de cargas

$$\begin{aligned}
\tilde{b}_V &= \hat{b}_V - b_V \\
\tilde{b}_T &= \hat{b}_T - b_T \\
\tilde{b}_j &= \hat{b}_j - b_j \\
\tilde{b}_c &= \hat{b}_c - b_c
\end{aligned}$$

y los vectores de error de estimación de cargas:

$$\tilde{b} = [\tilde{b}_V, \tilde{b}_T, \tilde{b}_j, \tilde{b}_c]^T \quad (\text{C.16})$$

$$\tilde{b}_y = [\tilde{b}_V, \tilde{b}_T, \tilde{b}_j]^T \quad (\text{C.17})$$

$$\tilde{b}_h = [\tilde{b}_T, \tilde{b}_j]^T \quad (\text{C.18})$$

$$b = [b_V, b_T, b_j, b_c]^T$$

$$b_y = [b_V, b_T, b_j]^T$$

$$b_h = [b_T, b_j]^T$$

$$\hat{b} = [\hat{b}_V, \hat{b}_T, \hat{b}_j, \hat{b}_c]^T$$

$$\hat{b}_y = [\hat{b}_V, \hat{b}_T, \hat{b}_j]^T$$

$$\hat{b}_h = [\hat{b}_T, \hat{b}_j]^T$$

C.1 Dinámica de error de regulación de concentración

La dinámica de error de regulación de concentración es:

$$\begin{aligned}\dot{e}_c &= \dot{c} - \dot{\bar{c}} = \dot{c} \\ \bar{c} &= cte\end{aligned}$$

sustituyendo la dinámica de concentración:

$$\dot{e}_c = a_c q_e + b_c$$

como:

$$b_c = \hat{b}_c - \tilde{b}_c$$

sustituyendo en la ecuación anterior se obtiene

$$\dot{e}_c = a_c q_e + \hat{b}_c - \tilde{b}_c$$

Por otro lado el control de concentración es:

$$q_e = -\frac{k_c \hat{y}_c + \hat{b}_c}{a_c} = f(\hat{y}_c, \hat{b}_c) \quad (\text{C.19})$$

sustituyendo el control en la dinámica de error

$$\dot{e}_c = a_c q_e + \hat{b}_c - \tilde{b}_c \quad (\text{C.20})$$

$$\dot{e}_c = a_c \left(-\frac{k_c \hat{y}_c + \hat{b}_c}{a_c} \right) + \hat{b}_c - \tilde{b}_c \quad (\text{C.21})$$

$$\dot{e}_c = -k_c \hat{y}_c - \tilde{b}_c \quad (\text{C.22})$$

donde \hat{y}_c es el estimado de la medición virtual y_c , utilizando las definiciones de r y su estimado \hat{r}

$$\begin{aligned}r &(y_T, y_j, y_V, b_T, b_j, q_e, q_j, T_e, T_{je}) \\ \hat{r} &(y_T, y_j, y_V, \hat{b}_T, \hat{b}_j, \hat{q}_e, \hat{q}_j, T_e, T_{je})\end{aligned}$$

donde \hat{q}_e y \hat{q}_j son las senales de control calculadas con los valores estimados de $\hat{y}_c, \hat{b}_c, \hat{b}_T, \hat{b}_j$.

De las dependencias de las ecuaciones del control de temperatura

$$T_j^* = - \left[\frac{k_T (y_T - \bar{T}) + \hat{b}_T}{a_T} \right] = f(\hat{b}_T, y_T) \quad (\text{C.23})$$

$$\dot{T}_j^* = - \left[\frac{k_T (a_T y_j + \hat{b}_T)}{a_T} \right] = f(\hat{b}_T, y_j) \quad (\text{C.24})$$

$$q_j = \frac{k_j (y_j - T_j^*) + a_T (y_T - \bar{T}) + \hat{b}_j - \dot{T}_j^*}{a_j} \quad (\text{C.25})$$

claramente se observa que \hat{q}_j depende de:

$$\hat{q}_j = f(y_T, y_j, \hat{b}_T, \hat{b}_j)$$

y \hat{r} se puede escribir como:

$$\hat{r}(y_T, y_j, y_V, \hat{b}_T, \hat{b}_j, \hat{y}_c, \hat{b}_c, T_e, T_{je})$$

y la mediciones virtuales y_c y su estimado \hat{y}_c se pueden escribir como

$$\begin{aligned} y_c &= \sigma(r, y_T) = \sigma(y_T, y_j, y_V, b_T, b_j, y_c, b_c, T_e, T_{je}) = \sigma(e_y, b_h, y_c, b_c, w) \\ \hat{y}_c &= \sigma(\hat{r}, y_T) = \sigma(y_T, y_j, y_V, \hat{b}_T, \hat{b}_j, \hat{y}_c, \hat{b}_c, T_e, T_{je}) = \sigma(e_y, \hat{b}_h, \hat{y}_c, \hat{b}_c, w) \end{aligned}$$

donde:

$$w = [T_e, T_{je}]^T$$

Con ambas mediciones se puede definir una función de error $\tilde{c} = \tilde{h} = \hat{y}_c - y_c$:

$$\begin{aligned} \hat{y}_c - y_c &= \sigma(e_y, \hat{b}_h, \hat{y}_c, \hat{b}_c, w) - \sigma(e_y, b_h, y_c, b_c, w) \\ \hat{y}_c - y_c &= f(e_y, b_h, y_c, b_c, \hat{b}_h, \hat{y}_c, \hat{b}_c, w) \\ \tilde{h} &= f(e_y, b_h, y_c, b_c, \hat{b}_h, \hat{y}_c, \hat{b}_c, w) \end{aligned}$$

y utilizando las definiciones

$$\hat{b}_h = \tilde{b}_h + b_h \quad (\text{C.26})$$

$$\hat{b}_c = \tilde{b}_c + b_c \quad (\text{C.27})$$

$$y_c = e_c \quad (\text{C.28})$$

$$\hat{y}_c = e_c + \tilde{h} \quad (\text{C.29})$$

la función \tilde{h} puede escribirse como:

$$\tilde{h} = f(e_y, b_h, y_c, b_c, \tilde{b}_h + b_h, \tilde{h} + y_c, \tilde{b}_c + b_c, w)$$

$$\tilde{h} = f(e_y, e_c, b_h, b_c, w; \tilde{b}_h, \tilde{b}_c, \tilde{h})$$

$$\tilde{h} = f(e, b_h, b_c, w; \tilde{b}_h, \tilde{b}_c, \tilde{h})$$

y finalmente sustituyendo (C.29) en la dinámica de error (C.22) se obtiene:

$$\dot{e}_c = -k_c (e_c + \tilde{h}) - \tilde{b}_c$$

$$\dot{e}_c = -k_c e_c - k_c \tilde{h} - \tilde{b}_c$$

$$\dot{e}_c = -k_c e_c - \tilde{b}_c - k_c \tilde{h}(e, b_h, b_c, w; \tilde{b}_h, \tilde{b}_c, \tilde{h})$$

C.2 Dinámica de error de estimación de concentración

Por otro lado, por definición $\tilde{b}_c = \hat{b}_c - b_c$, por lo que su derivada temporal es:

$$\dot{\tilde{b}}_c = \dot{\hat{b}}_c - \dot{b}_c \quad (\text{C.30a})$$

para el cálculo de $\dot{\hat{b}}_c$ por definición:

$$\dot{\hat{b}}_c = \chi_c + \omega_c \hat{y}_c$$

$$\dot{\chi}_c = -\omega_c \chi_c - \omega_c (\omega_c \hat{y}_c + a_c q_e) = f(\hat{y}_c, \hat{b}_c)$$

por lo tanto

$$\begin{aligned}\dot{\hat{b}}_c &= \dot{\chi}_c + \omega_c \dot{\hat{y}}_c \\ \dot{\hat{b}}_c &= -\omega_c \chi_c - \omega_c (\omega_c \hat{y}_c + a_c q_e) + \omega_c \dot{\hat{y}}_c\end{aligned}$$

y sustituyendo el control en lazo cerrado (C.19) q_e y la variable auxiliar χ_c

$$\begin{aligned}q_e &= -\frac{k_c \hat{y}_c + \hat{b}_c}{a_c} \\ \chi_c &= \hat{b}_c - \omega_c \hat{y}_c\end{aligned}$$

$$\dot{\hat{b}}_c = -\omega_c \chi_c - \omega_c^2 \hat{y}_c - \omega_c a_c q_e + \omega_c \dot{\hat{y}}_c \quad (\text{C.31})$$

$$\dot{\hat{b}}_c = -\omega_c (\hat{b}_c - \omega_c \hat{y}_c) - \omega_c^2 \hat{y}_c - \omega_c a_c \left(-\frac{k_c \hat{y}_c + \hat{b}_c}{a_c} \right) + \omega_c \dot{\hat{y}}_c \quad (\text{C.32})$$

$$\dot{\hat{b}}_c = -\omega_c \hat{b}_c + \omega_c^2 \hat{y}_c - \omega_c^2 \hat{y}_c + k_c \omega_c \hat{y}_c + \omega_c \hat{b}_c + \omega_c \dot{\hat{y}}_c \quad (\text{C.33})$$

$$\dot{\hat{b}}_c = k_c \omega_c \hat{y}_c + \omega_c \dot{\hat{y}}_c \quad (\text{C.34})$$

sustituyendo (C.34) en (C.30a)

$$\dot{\tilde{b}}_c = k_c \omega_c \hat{y}_c + \omega_c \dot{\hat{y}}_c - \dot{\hat{b}}_c$$

sustituyendo $\hat{y}_c = e_c + \tilde{h}$, su derivada $\dot{\hat{y}}_c = \dot{e}_c + \dot{\tilde{h}}$ y la dinámica de concentración $\dot{e}_c = -k_c e_c - k_c \tilde{h} - \dot{\tilde{b}}_c$

$$\dot{\tilde{b}}_c = k_c \omega_c (e_c + \tilde{h}) + \omega_c (\dot{e}_c + \dot{\tilde{h}}) - \dot{\hat{b}}_c$$

$$\dot{\tilde{b}}_c = k_c \omega_c e_c + k_c \omega_c \tilde{h} + \omega_c \dot{e}_c + \omega_c \dot{\tilde{h}} - \dot{\hat{b}}_c$$

$$\dot{\tilde{b}}_c = k_c \omega_c e_c + k_c \omega_c \tilde{h} + \omega_c (-k_c e_c - k_c \tilde{h} - \dot{\tilde{b}}_c) + \omega_c \dot{\tilde{h}} - \dot{\hat{b}}_c$$

$$\dot{\tilde{b}}_c = k_c \omega_c e_c + k_c \omega_c \tilde{h} - k_c \omega_c e_c - k_c \omega_c \tilde{h} - \omega_c \dot{\tilde{b}}_c + \omega_c \dot{\tilde{h}} - \dot{\hat{b}}_c$$

$$\dot{\tilde{b}}_c = -\omega_c \dot{\tilde{b}}_c + \omega_c \dot{\tilde{h}} - \dot{\hat{b}}_c$$

Se define la función \tilde{g} como

$$\begin{aligned} \tilde{g} &= \dot{\tilde{h}} = \frac{\partial \tilde{h}}{\partial e} f + \frac{\partial \tilde{h}}{\partial b_h} \dot{b}_h + \frac{\partial \tilde{h}}{\partial b_c} \dot{b}_c + \frac{\partial \tilde{h}}{\partial w} \dot{w} \\ &\tilde{g}(e, b_h, b_c, w, \dot{b}_h, \dot{b}_c, \dot{w}) \end{aligned}$$

y la función θ_c

$$\begin{aligned} \theta_c &= \dot{b}_c = \frac{\partial \beta_c}{\partial e} f + \frac{\partial \beta_c}{\partial d_a} \dot{d}_a + \frac{\partial \beta_c}{\partial u} \dot{u} \\ &\theta_c(e, d_a, u; \dot{d}_a, \dot{u}) \end{aligned}$$

con

$$\begin{aligned} d_a &= [w^T, d]^T \\ b_c &= \beta_c(c, V, T, q_e, c_e) \\ u &= f(y, b, w) = f(e, b, d_a) \\ \dot{u} &= f(\dot{y}, \dot{b}, \dot{w}) = f(e, b_h, b_c, d_a, \dot{b}_h, \dot{b}_c, \dot{d}_a) \end{aligned}$$

por lo tanto la función $\theta_c(e, d_a, u; \dot{d}_a, \dot{u})$ tiene la siguiente dependencia

$$\theta_c(e, d_a, u; \dot{d}_a, \dot{u}) = \theta_c(e, b, d_a, \dot{b}, \dot{d}_a)$$

Finalmente se puede escribir

$$\dot{\tilde{b}}_c = -\omega_c \tilde{b}_c - \theta_c(e, b, d_a, \dot{b}, \dot{d}_a) + \omega_c \tilde{g}(e, b_h, b_c, d_a, \dot{b}_h, \dot{b}_c, \dot{d}_a)$$

C.3 Dinámica de error de regulación de volumen

Se parte de la dinámica de error de regulación de volumen

$$\begin{aligned}\dot{e}_V &= \dot{V} - \dot{\bar{V}} = \dot{V} \\ \bar{V} &= cte\end{aligned}$$

sustituyendo la dinámica de volumen $\dot{V} = -a_V q + b_V$:

$$\dot{e}_V = -a_V q + b_V$$

como:

$$b_V = \hat{b}_V - \tilde{b}_V$$

y sustituyendo en la ecuación anterior se obtiene

$$\dot{e}_V = -a_V q + \hat{b}_V - \tilde{b}_V$$

Por otro lado el control de volumen es:

$$q = \frac{k_V (y_V - \bar{V}) + \hat{b}_V}{a_V} \quad (\text{C.35})$$

$$q = \frac{k_V e_V + \hat{b}_V}{a_V} \quad (\text{C.36})$$

sustituyendo el control en la dinámica de error

$$\begin{aligned}\dot{e}_V &= -a_V \left(\frac{k_V e_V + \hat{b}_V}{a_V} \right) + \hat{b}_V - \tilde{b}_V \\ \dot{e}_V &= -k_V e_V - \hat{b}_V + \hat{b}_V - \tilde{b}_V \\ \dot{e}_V &= -k_V e_V - \tilde{b}_V\end{aligned}$$

C.4 Dinámica de error de estimación de volumen

Por otro lado, por definición $\tilde{b}_V = \hat{b}_V - b_V$, por lo que la derivada temporal es:

$$\dot{\tilde{b}}_V = \dot{\hat{b}}_V - \dot{b}_V$$

tambien por definición:

$$\hat{b}_V = \chi_V + \omega_V y_V$$

$$\dot{\hat{b}}_V = \dot{\chi}_V + \omega_V \dot{y}_V$$

$$\dot{\chi}_V = -\omega_V \chi_V - \omega_V (\omega_V y_V - a_V q)$$

$$\chi_V = \hat{b}_V - \omega_V y_V$$

$$q = \frac{k_V y_V + \hat{b}_V}{a_V}$$

$$\dot{\chi}_V = -\omega_V (\hat{b}_V - \omega_V y_V) - \omega_V^2 y_V + \omega_V a_V \left(\frac{k_V y_V + \hat{b}_V}{a_V} \right)$$

$$\dot{\chi}_V = -\omega_V \hat{b}_V + \omega_V^2 y_V - \omega_V^2 y_V + \omega_V k_V y_V + \omega_V \hat{b}_V$$

$$\dot{\chi}_V = \omega_V k_V y_V$$

$$\dot{\hat{b}}_V = k_V \omega_V y_V + \omega_V \dot{y}_V$$

$$\dot{\hat{b}}_V = k_V \omega_V y_V + \omega_V (-a_V q + b_V)$$

$$\dot{\hat{b}}_V = k_V \omega_V y_V - \omega_V a_V q + \omega_V b_V$$

$$\dot{\hat{b}}_V = k_V \omega_V y_V - \omega_V a_V \left(\frac{k_V y_V + \hat{b}_V}{a_V} \right) + \omega_V b_V$$

$$\dot{\hat{b}}_V = k_V \omega_V y_V - \omega_V k_V y_V - \omega_V \hat{b}_V + \omega_V b_V$$

$$\dot{\hat{b}}_V = -\omega_V (\hat{b}_V - b_V) = -\omega_V \tilde{b}_V$$

finalmente

$$\dot{\tilde{b}}_V = -\omega_V \tilde{b}_V - \dot{b}_V$$

C.5 Dinámica de regulación de temperatura

Se parte de la dinámica de error de regulación de temperatura

$$\begin{aligned}\dot{e}_T &= \dot{T} - \dot{\bar{T}} = \dot{T} \\ \bar{T} &= cte\end{aligned}$$

sustituyendo la dinámica de temperatura $\dot{T} = a_T T_j + b_T$:

$$\dot{e}_T = a_T T_j + b_T$$

como:

$$b_T = \hat{b}_T - \tilde{b}_T$$

y sustituyendo en la ecuación anterior se obtiene

$$\dot{e}_T = a_T T_j + \hat{b}_T - \tilde{b}_T$$

Por otro lado el control de temperatura es

$$T_j^* = - \left[\frac{k_T (y_T - \bar{T}) + \hat{b}_T}{a_T} \right] \quad (\text{C.37})$$

$$T_j = e_j^* + T_j^* \quad (\text{C.38})$$

sustituyendo el control en la dinámica de error

$$\begin{aligned}\dot{e}_T &= a_T e_j^* + a_T T_j^* + \hat{b}_T - \tilde{b}_T \\ \dot{e}_T &= a_T e_j^* - k_T (y_T - \bar{T}) - \hat{b}_T + \hat{b}_T - \tilde{b}_T \\ \dot{e}_T &= -k_T e_T + a_T e_j^* - \tilde{b}_T\end{aligned}$$

C.6 Dinámica de error de estimación de temperatura

Por otro lado, por definición $\tilde{b}_T = \hat{b}_T - b_T$, por lo que la derivada temporal es

$$\dot{\tilde{b}}_T = \dot{\hat{b}}_T - \dot{b}_T$$

también por definición

$$\hat{b}_T = \chi_T + \omega_T y_T$$

$$\dot{\hat{b}}_T = \dot{\chi}_T + \omega_T \dot{y}_T$$

$$\dot{\chi}_T = -\omega_T \chi_T - \omega_T (\omega_T y_T + a_T y_j)$$

$$\chi_T = \hat{b}_T - \omega_T y_T$$

$$\dot{T} = a_T T_j + b_T$$

$$y_j = T_j$$

$$\dot{\hat{b}}_T = -\omega_T \chi_T - \omega_T (\omega_T y_T + a_T y_j) + \omega_T (a_T T_j + b_T)$$

$$\dot{\hat{b}}_T = -\omega_T (\hat{b}_T - \omega_T y_T) - \omega_T^2 y_T - a_T \omega_T y_j + a_T \omega_T T_j + \omega_T b_T$$

$$\dot{\hat{b}}_T = -\omega_T \hat{b}_T + \omega_T b_T + a_T \omega_T y_j + \omega_T a_T y_j$$

$$\dot{\hat{b}}_T = -\omega_T (\hat{b}_T - b_T)$$

$$\dot{\hat{b}}_T = -\omega_T \tilde{b}_T$$

finalmente

$$\dot{\tilde{b}}_T = -\omega_T \tilde{b}_T - \dot{b}_T$$

C.7 Dinámica de error de regulación de temperatura de camisa

Se parte de la dinámica de error de regulación de temperatura

$$\dot{e}_j^* = \dot{T}_j - \dot{T}_j^*$$

sustituyendo la dinámica de temperatura $\dot{T}_j = -a_j q_j + b_j$:

$$\dot{e}_j^* = -a_j q_j + b_j - \dot{T}_j^*$$

como

$$b_j = \hat{b}_j - \tilde{b}_j$$

y sustituyendo en la ecuación anterior se obtiene

$$\dot{e}_j^* = -a_j q_j + \hat{b}_j - \tilde{b}_j - \dot{T}_j^*$$

Por otro lado el control de temperatura es:

$$q_j = \frac{k_j (y_j - T_j^*) + a_T (y_T - \bar{T}) + \hat{b}_j - \dot{T}_j^*}{a_j}$$

sustituyendo el control en la dinámica de error

$$\begin{aligned} \dot{e}_j^* &= -a_j q_j + \hat{b}_j - \tilde{b}_j - \dot{T}_j^* \\ \dot{e}_j^* &= -k_j (y_j - T_j^*) - a_T (y_T - \bar{T}) - \hat{b}_j + \dot{T}_j^* + \hat{b}_j - \tilde{b}_j - \dot{T}_j^* \\ \dot{e}_j^* &= -k_j e_j^* - a_T e_T - \tilde{b}_j \end{aligned}$$

C.8 Dinámica de error de estimación de temperatura de camisa

Por otro lado, por definición $\tilde{b}_j = \hat{b}_j - b_j$, por lo que la derivada temporal es

$$\dot{\tilde{b}}_j = \dot{\hat{b}}_j - \dot{b}_j$$

tambien por definición

$$\begin{aligned} \hat{b}_j &= \chi_j + \omega_j y_j \\ \dot{\hat{b}}_j &= \dot{\chi}_j + \omega_j \dot{y}_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{\chi}_j &= -\omega_j \chi_j - \omega_j (\omega_j y_j - a_j q_j) \\
\chi_j &= \hat{b}_j - \omega_j y_j \\
\dot{T}_j &= -a_j q_j + b_j \\
\tilde{b}_j &= \hat{b}_j - b_j \\
y_j &= T_j
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{\hat{b}}_j &= -\omega_j \chi_j - \omega_j (\omega_j y_j - a_j q_j) + \omega_j (-a_j q_j + b_j) \\
\dot{\hat{b}}_j &= -\omega_j (\hat{b}_j - \omega_j y_j) - \omega_j (\omega_j y_j - a_j q_j) + \omega_j (-a_j q_j + b_j) \\
\dot{\hat{b}}_j &= -\omega_j \hat{b}_j + \omega_j^2 y_j - \omega_j^2 y_j + a_j \omega_j q_j - a_j \omega_j q_j + \omega_j b_j \\
\dot{\hat{b}}_j &= -\omega_j \hat{b}_j + \omega_j b_j \\
\dot{\hat{b}}_j &= -\omega_j (\hat{b}_j - b_j) \\
\tilde{b}_j &= \hat{b}_j - b_j \\
\dot{\tilde{b}}_j &= -\omega_j \tilde{b}_j
\end{aligned}$$

finalmente

$$\dot{\tilde{b}}_j = -\omega_j \tilde{b}_j - \dot{b}_j$$

De este modo la dinámica de error a lazo cerrado es:

$$\begin{aligned}
\dot{e}_V &= -k_V e_V - \tilde{b}_V \\
\dot{e}_T &= -k_T e_T + a_T e_j^* - \tilde{b}_T \\
\dot{e}_j^* &= -k_j e_j^* - a_T e_T - \tilde{b}_j \\
\dot{\tilde{b}}_V &= -\omega_V \tilde{b}_V - \dot{b}_V \\
\dot{\tilde{b}}_T &= -\omega_T \tilde{b}_T - \dot{b}_T \\
\dot{\tilde{b}}_j &= -\omega_j \tilde{b}_j - \dot{b}_j \\
\dot{e}_c &= -k_c e_c - \tilde{b}_c - k_c \tilde{h}(e, b_h, b_c, w; \tilde{b}_h, \tilde{b}_c, \tilde{h}) \\
\dot{\tilde{b}}_c &= -\omega_c \tilde{b}_c - \theta_c(e, d_a, u, \dot{d}_a, \dot{u}) + \omega_c \tilde{g}(e, b_h, b_c, w, \dot{b}_h, \dot{b}_c, \dot{w})
\end{aligned}$$

que se puede reescribir como

$$\dot{e}_y = -A_y e_y - \tilde{b}_y \quad (\text{C.39})$$

$$\dot{\tilde{b}}_y = -\Omega_y \tilde{b}_y - \theta_y(e, b, d_a, \dot{b}, \dot{d}_a) \quad (\text{C.40})$$

$$\dot{e}_c = -k_c e_c - \tilde{b}_c - k_c \tilde{h}(e, b_h, b_c, w; \tilde{b}_h, \tilde{b}_c, \tilde{h}) \quad (\text{C.41})$$

$$\dot{\tilde{b}}_c = -\omega_c \tilde{b}_c - \theta_c(e, b, d_a, \dot{b}, \dot{d}_a) + \omega_c \tilde{g}(e, b_h, b_c, d_a, \dot{b}_h, \dot{b}_c, \dot{d}_a) \quad (\text{C.42})$$

donde:

$$\begin{aligned}
A_y &= \begin{bmatrix} k_V & 0 & 0 \\ 0 & k_T & -a_T \\ 0 & a_T & k_j \end{bmatrix} \\
\Omega_y &= \begin{bmatrix} \omega_V & 0 & 0 \\ 0 & \omega_T & 0 \\ 0 & 0 & \omega_j \end{bmatrix} \\
\theta_y &= \dot{b}_y = \frac{\partial \beta}{\partial e} f + \frac{\partial \beta}{\partial d_a} \dot{d}_a + \frac{\partial \beta}{\partial u} \dot{u} \\
\dot{b}_y &= [\dot{b}_V, \dot{b}_T, \dot{b}_j]^T
\end{aligned}$$

$$\beta(e, d_a, u) = f(x, u, d_a) - Au$$

$$A = \text{diag}(-a_V, a_T, -a_j, a_c)$$

Las cuatro funciones (θ_y , θ_c , \tilde{h} y \tilde{g}) se hacen cero cuando:

$$\tilde{h}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) = 0$$

$$\tilde{g}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) = 0$$

$$\theta_c(0, 0, 0, 0, 0) = 0$$

$$\theta_y(0, 0, 0, 0, 0) = 0$$

Apéndice D

Dinámica de error a lazo cerrado: caso no monótono

D.1 Dinámica de error de estimación de concentración

A partir del control de concentración

- Control de concentración

$$\begin{aligned}\dot{\hat{c}} &= \beta(\hat{c}, y, u_h, \chi_h, d_a) \\ q_e &= \gamma(\hat{c}, y, q_j, \chi_h, d_a)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{\hat{c}} &= \beta = - \left[\frac{a_T y_j + \chi_T - \omega_T y_T + \frac{\chi_j - \omega_j y_j + [\varpi_j(y_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi y_V}}{\Delta} \right] + \dots \\ \frac{q_e}{y_V} &= \left[\frac{y_T - T_e}{\Delta} + (c_e - \hat{c}) \right] \\ q_e &= \gamma = \left[-k_c(\hat{c} - \bar{c}) + \frac{a_T y_j + \chi_T - \omega_T y_T + \frac{\chi_j - \omega_j y_j + [\varpi_j(y_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi y_V}}{\Delta} \right] \\ &\quad \left[\frac{y_V}{\frac{y_T - T_e}{\Delta} + (c_e - \hat{c})} \right]\end{aligned}$$

definiendo una nueva función

$$\phi(y, \chi_h, q_j) = \frac{a_T y_j + \chi_T - \omega_T y_T + \frac{\chi_j - \omega_j y_j + [\omega_j (y_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\omega y_V}}{\Delta}$$

$$\begin{aligned} \dot{\hat{c}} &= -\phi(y, \chi_h, q_j) + \frac{q_e}{y_V} \left[\frac{y_T - T_e}{\Delta} + (c_e - \hat{c}) \right] \\ q_e &= [-k_c(\hat{c} - \bar{c}) + \phi(y, \chi_h, q_j)] \left[\frac{y_V}{\frac{y_T - T_e}{\Delta} + (c_e - \hat{c})} \right] \end{aligned}$$

sustituyendo el control q_e en $\dot{\hat{c}}$

$$\begin{aligned} \dot{\hat{c}} &= -\phi(y, \chi_h, q_j) + \frac{q_e}{y_V} \left[\frac{y_T - T_e}{\Delta} + (c_e - \hat{c}) \right] \\ \dot{\hat{c}} &= -\phi(y, \chi_h, q_j) + q_e \left[\frac{\frac{y_T - T_e}{\Delta} + (c_e - \hat{c})}{y_V} \right] \\ \dot{\hat{c}} &= -\phi(y, \chi_h, q_j) + \dots \\ &\quad + [-k_c(\hat{c} - \bar{c}) + \phi(y, \chi_h, q_j)] \left[\frac{y_V}{\frac{y_T - T_e}{\Delta} + (c_e - \hat{c})} \right] \left[\frac{\frac{y_T - T_e}{\Delta} + (c_e - \hat{c})}{y_V} \right] \\ \dot{\hat{c}} &= -\phi(y, \chi_h, q_j) + [-k_c(\hat{c} - \bar{c}) + \phi(y, \chi_h, q_j)] \\ \dot{\hat{c}} &= -k_c(\hat{c} - \bar{c}) \end{aligned}$$

A partir de la dinámica de concentración y la dinámica del detector (observador a lazo abierto):

$$\begin{aligned} \dot{c} &= -r + \frac{q_e}{V} (c_e - c) \\ \dot{\hat{c}} &= -\hat{r} + \frac{q_e}{V} (c_e - \hat{c}) \end{aligned}$$

se definen los siguientes errores de estimación y de regulación

$$\begin{aligned}
\epsilon_r &= \hat{r} - r \\
\epsilon_c &= \hat{c} - c \\
e_c &= c - \bar{c} \\
c &= \hat{c} - \bar{c}
\end{aligned}$$

por lo tanto

$$\epsilon_c = \hat{c} - c = c - e_c$$

al tomar la derivada de ϵ_c

$$\begin{aligned}
\dot{\epsilon}_c &= \dot{\hat{c}} - \dot{c} = -\dot{r} + \frac{q_e}{V} (c_e - \hat{c}) - \left[-r + \frac{q_e}{V} (c_e - c) \right] \\
\dot{\epsilon}_c &= -\dot{r} + \frac{q_e}{V} (c_e - \hat{c}) + r - \frac{q_e}{V} (c_e - c) \\
\dot{\epsilon}_c &= -(\dot{r} - r) - \frac{q_e}{V} (\hat{c} - c) \\
\dot{\epsilon}_c &= -\frac{q_e}{V} \epsilon_c - \epsilon_r
\end{aligned}$$

por otro lado ϵ_r se puede escribir como:

$$\begin{aligned}
r &= \frac{b_T + \frac{q_e}{V} (T - T_e) + \frac{b_j + [\varpi_j (T_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi V} + a_T T_j}{\Delta} \\
\hat{r} &= \frac{\hat{b}_T + \frac{q_e}{V} (T - T_e) + \frac{\hat{b}_j + [\varpi_j (T_j - T_{je}) - a_j] q_j}{\varpi V} + a_T T_j}{\Delta}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \epsilon_r &= \frac{\hat{b}_T + \frac{q_e}{V}(T - T_e) + \frac{\hat{b}_j + [\varpi_j(T_j - T_{je}) - a_j]q_j}{\varpi V} + a_T T_j}{\Delta} - \\ &\quad \frac{b_T + \frac{q_e}{V}(T - T_e) + \frac{b_j + [\varpi_j(T_j - T_{je}) - a_j]q_j}{\varpi V} + a_T T_j}{\Delta} \\ \Delta \epsilon_r &= \hat{b}_T - b_T + \frac{\hat{b}_j - b_j}{\varpi V} \\ \Delta \epsilon_r &= \tilde{b}_T + \frac{\tilde{b}_j}{\varpi V} \\ \epsilon_r &= \frac{1}{\Delta} \left[\tilde{b}_T + \frac{\tilde{b}_j}{\varpi V} \right] \end{aligned}$$

por lo tanto $\dot{\epsilon}_c$ se puede escribir como:

$$\dot{\epsilon}_c = -\frac{q_e}{V}\epsilon_c - \frac{1}{\Delta} \left[\tilde{b}_T + \frac{\tilde{b}_j}{\varpi V} \right]$$

D.2 Dinámica de error de regulación de concentración

Por otro lado, e_c se puede escribir como

$$\begin{aligned} \bar{c} &= \hat{c} - c \\ c &= \hat{c} - \epsilon_c \\ e_c &= \hat{c} - \epsilon_c - \hat{c} + c \\ e_c &= c - \epsilon_c \end{aligned}$$

además se sabe que

$$\dot{\hat{c}} = -k_c(\hat{c} - \bar{c})$$

y tomando la derivada de

$$\begin{aligned} \dot{c} &= \dot{\hat{c}} - \dot{\epsilon}_c \\ \dot{c} &= \dot{\hat{c}} \end{aligned}$$

sigue que

$$\begin{aligned}\dot{c} &= \dot{\hat{c}} = -k_c(\hat{c} - \bar{c}) \\ \dot{c} &= -k_{cc}\end{aligned}$$

tomando la derivada de e_c

$$\dot{e}_c = \dot{c} - \dot{\epsilon}_c$$

y sustituyendo \dot{c} y $\dot{\epsilon}_c$

$$\dot{e}_c = -k_{cc} + \frac{q_e}{V}\epsilon_c + \frac{1}{\Delta} \left[\tilde{b}_T + \frac{\tilde{b}_j}{\varpi V} \right]$$

y finalmente sustituyendo $c = e_c + \epsilon_c$

$$\begin{aligned}\dot{e}_c &= -k_c(e_c + \epsilon_c) + \frac{q_e}{V}\epsilon_c + \frac{1}{\Delta} \left[\tilde{b}_T + \frac{\tilde{b}_j}{\varpi V} \right] \\ \dot{e}_c &= -k_c e_c + \left(\frac{q_e}{V} - k_c \right) \epsilon_c + \frac{1}{\Delta} \left[\tilde{b}_T + \frac{\tilde{b}_j}{\varpi V} \right]\end{aligned}$$

Resumiendo

$$\begin{aligned}\dot{e}_c &= -\frac{q_e}{e_V + \bar{V}}\epsilon_c - \frac{1}{\Delta} \left[\tilde{b}_T + \frac{\tilde{b}_j}{\varpi (e_V + \bar{V})} \right] \\ \dot{e}_c &= -k_c e_c - \left[k_c - \frac{q_e}{e_V + \bar{V}} \right] \epsilon_c + \frac{1}{\Delta} \left[\tilde{b}_T + \frac{\tilde{b}_j}{\varpi (e_V + \bar{V})} \right]\end{aligned}$$

definiendo

$$\begin{aligned}h(e_y, \tilde{b}_T, \tilde{b}_j) &= \frac{1}{\Delta} \left[\tilde{b}_T + \frac{\tilde{b}_j}{\varpi (e_V + \bar{V})} \right] \\ \lambda_\epsilon(e_c, e_y, \epsilon_c, \tilde{b}_y, d_a) &= \frac{q_e}{e_V + \bar{V}} \\ \lambda_e(e_c, e_y, \epsilon_c, \tilde{b}_y, d_a) &= k_c - \frac{q_e}{e_V + \bar{V}}\end{aligned}$$

se puede reescribir como:

$$\begin{aligned}\dot{\epsilon}_c &= -\lambda_\epsilon(e_c, e_y, \tilde{b}_y, d_a)\epsilon_c - h(e_y, \tilde{b}_T, \tilde{b}_j) \\ \dot{e}_c &= -k_c e_c - \lambda_e(e_c, e_y, \tilde{b}_y, d_a)\epsilon_c + h(e_y, \tilde{b}_T, \tilde{b}_j)\end{aligned}$$

o bien

$$\begin{aligned}\dot{\epsilon}_c &= -\lambda_\epsilon(e_c, e_y, \epsilon_c, \tilde{b}_y, d_a) - h(e_y, \tilde{b}_T, \tilde{b}_j) \\ \dot{e}_c &= -k_c e_c - \lambda_e(e_c, e_y, \epsilon_c, \tilde{b}_y, d_a) + h(e_y, \tilde{b}_T, \tilde{b}_j)\end{aligned}$$

Apéndice E

Deducción de condiciones de estabilidad para el caso monótono

Se parte de la dinámica de error a lazo cerrado

$$\dot{e}_y = -A_y e_y - \tilde{b}_y \quad (\text{E.1})$$

$$\dot{\tilde{b}}_y = -\Omega_y \tilde{b}_y - \theta_y(e, b_y, d_a, \dot{d}_a) \quad (\text{E.2})$$

$$\dot{e}_c = -k_c e_c - \tilde{b}_c - k_c \tilde{h}(e, b_y, b_c, w; \tilde{b}_h, \tilde{b}_c, \tilde{h}) \quad (\text{E.3})$$

$$\dot{\tilde{b}}_c = -\omega_c \tilde{b}_c - \theta_c(e, b, d_a, \dot{b}, \dot{d}_a) + \omega_c \tilde{g}(e, b_y, b_c, d_a, \dot{b}_h, \dot{b}_c, \dot{d}_a) \quad (\text{E.4})$$

Esta dinámica se puede acotar utilizando el Lemma de Gronwall

$$\begin{aligned} \|\dot{e}_y\| &\leq -k_y \|e_y\| - \|\tilde{b}_y\| \\ \|\dot{\tilde{b}}_y\| &\leq -\omega_y \|\tilde{b}_y\| - L(\theta_y, e_c) \|e_c\| - L(\theta_y, e_y) \|e_y\| - L(\theta_y, \tilde{b}_y) \|\tilde{b}_y\| \\ \|\dot{e}_c\| &\leq -k_c \|e_c\| - \|\tilde{b}_c\| - k_c L(\tilde{h}, e_y) \|e_y\| - k_c L(\tilde{h}, \tilde{b}_y) \|\tilde{b}_y\| \\ \|\dot{\tilde{b}}_c\| &\leq -\omega_c \|\tilde{b}_c\| - L(\theta_c, e_c) \|e_c\| - L(\theta_c, e_y) \|e_y\| - L(\theta_c, \tilde{b}_y) \|\tilde{b}_y\| + \dots \\ &\quad - L(\theta_c, \tilde{b}_c) \|\tilde{b}_c\| + \omega_c L(\tilde{g}, e_y) \|e_y\| - \omega_c L(\tilde{g}, e_c) \|e_c\| + \dots \\ &\quad - \omega_c L(\tilde{g}, \tilde{b}_y) \|\tilde{b}_y\| - \omega_c L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \|\tilde{b}_c\| \end{aligned}$$

o en forma equivalente:

$$\begin{bmatrix} \|\dot{e}_y\| \\ \|\dot{\tilde{b}}_y\| \\ \|\dot{e}_c\| \\ \|\dot{\tilde{b}}_c\| \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} -k_y & -1 & 0 & 0 \\ -L(\theta_y, e_y) & -\omega_y - L(\theta_y, \tilde{b}_y) & -L(\theta_y, e_c) & 0 \\ -k_c L(\tilde{g}, e_y) & -k_c L(\tilde{g}, \tilde{b}_y) & -k_c & -1 \\ \omega_c L(\tilde{g}, e_y) + \dots & \omega_c L(\tilde{g}, \tilde{b}_y) + \dots & \omega_c L(\tilde{g}, e_c) + \dots & -\omega_c [1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c)] + \dots \\ -L(\theta_c, e_y) & -L(\theta_c, \tilde{b}_y) & -L(\theta_c, e_c) & -L(\theta_c, \tilde{b}_c) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|e_y\| \\ \|\tilde{b}_y\| \\ \|e_c\| \\ \|\tilde{b}_c\| \end{bmatrix}$$

donde k_y (o ω_y) es el eigenvalor dominante de la matriz A_y (o Ω_y)

Analizando por separado la dinámica del subsistema de 2×2 de concentración se tiene

$$\begin{bmatrix} \|\dot{e}_c\| \\ \|\dot{\tilde{b}}_c\| \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} -k_c & -1 \\ \omega_c L(\tilde{g}, e_c) - L(\theta_c, e_c) & -\omega_c [1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c)] - L(\theta_c, \tilde{b}_c) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|e_c\| \\ \|\tilde{b}_c\| \end{bmatrix}$$

La dinámica es estable si la matriz $-A$ es Hurwitz

$$-A = \begin{bmatrix} k_c & 1 \\ L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c) & \omega_c [1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c)] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \end{bmatrix}$$

Para que esta matriz sea Hurwitz, los elementos de la diagonal principal y el determinante deben ser positivos, es decir

$$\begin{aligned} k_c &> 0 \\ \omega_c [1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c)] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) &> 0 \\ k_c (\omega_c [1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c)] + L(\theta_c, \tilde{b}_c)) - (L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c)) &> 0 \end{aligned}$$

lo que resulta en las condiciones de estabilidad de la dinámica de concentración.

$$\begin{aligned} \omega_c &> \frac{L(\theta_c, \tilde{b}_c)}{L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) - 1} \\ k_c &> \frac{L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c)}{\omega_c [1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c)] + L(\theta_c, \tilde{b}_c)} \end{aligned}$$

De la la dinámica del subsistema de 2×2 de temperatura-volumen se tiene

$$\begin{bmatrix} \|\dot{e}_y\| \\ \|\dot{\tilde{b}}_y\| \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} -k_y & -1 \\ -L(\theta_y, e_y) & -\omega_y - L(\theta_y, \tilde{b}_y) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|e_y\| \\ \|\tilde{b}_y\| \end{bmatrix}$$

Las condiciones de estabilidad para esta dinámica están dadas por la matriz

$$\begin{bmatrix} k_y & 1 \\ L(\theta_y, e_y) & \omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y) \end{bmatrix}$$

Para que esta matriz sea Hurwitz, los elementos de la diagonal principal y el determinante deben ser positivos, es decir

$$\begin{aligned} k_y &> 0 \\ \omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y) &> 0 \\ k_y \left(\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y) \right) - L(\theta_y, e_y) &> 0 \end{aligned}$$

lo que resulta en

$$\begin{aligned} \omega_y &> -L(\theta_y, \tilde{b}_y) \\ k_y &> \frac{L(\theta_y, e_y)}{\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y)} \end{aligned}$$

Por último se analiza la matriz 4×4 del sistema completo

$$\begin{bmatrix} -k_y & -1 & 0 & 0 \\ -L(\theta_y, e_y) & -\omega_y - L(\theta_y, \tilde{b}_y) & -L(\theta_y, e_c) & 0 \\ -k_c L(\tilde{h}, e_y) & -k_c L(\tilde{h}, \tilde{b}_y) & -k_c & -1 \\ \omega_c L(\tilde{g}, e_y) + \dots & \omega_c L(\tilde{g}, \tilde{b}_y) + \dots & \omega_c L(\tilde{g}, e_c) + \dots & -\omega_c [1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c)] + \dots \\ -L(\theta_c, e_y) & -L(\theta_c, \tilde{b}_y) & -L(\theta_c, e_c) & -L(\theta_c, \tilde{b}_c) \end{bmatrix}$$

cuyo determinante es:

$$\begin{aligned} & k_y \begin{vmatrix} \omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y) & L(\theta_y, e_c) & 0 \\ k_c L(\tilde{h}, \tilde{b}_y) & k_c & -1 \\ L(\theta_c, \tilde{b}_y) + \dots & L(\theta_c, e_c) + \dots & -\omega_c [1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c)] + \dots \\ -\omega_c L(\tilde{g}, \tilde{b}_y) & -\omega_c L(\tilde{g}, e_c) & -L(\theta_c, \tilde{b}_c) \end{vmatrix} + \\ & - \begin{vmatrix} L(\theta_y, e_y) & L(\theta_y, e_c) & 0 \\ k_c L(\tilde{h}, e_y) & k_c & -1 \\ \omega_c L(\tilde{g}, e_y) + \dots & \omega_c L(\tilde{g}, e_c) + \dots & -\omega_c [1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c)] + \dots \\ -L(\theta_c, e_y) & -L(\theta_c, e_c) & -L(\theta_c, \tilde{b}_c) \end{vmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& k_y \left[k_c \left(\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y) \right) \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) \right] + \dots \\
& k_y \left[\left(L(\theta_c, \tilde{b}_y) - \omega_c L(\tilde{g}, \tilde{b}_y) \right) L(\theta_y, e_c) \right] + \dots \\
& + k_y \left[- \left(\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y) \right) \left(L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c) \right) \right] + \dots \\
& - k_y \left[\left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) k_c L(\tilde{h}, \tilde{b}_y) L(\theta_y, e_c) \right] + \dots \\
& - \left[\left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) k_c L(\theta_y, e_y) \right] + \dots \\
& - \left[\left(L(\theta_c, e_y) - \omega_c L(\tilde{g}, e_y) \right) L(\theta_y, e_c) \right] + \dots \\
& - \left[- \left(L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c) \right) L(\theta_y, e_c) \right] + \dots \\
& + \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) k_c L(\tilde{h}, e_y) L(\theta_y, e_c)
\end{aligned}$$

simplificando

$$\begin{aligned}
& \left[k_y \left(\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y) \right) - L(\theta_y, e_y) \right] \left[k_c \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) \right] + \dots \\
& - \left[k_y \left(\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y) \right) - L(\theta_y, e_y) \right] \left[\left(L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c) \right) \right] + \dots \\
& + L(\theta_y, e_c) \left[L(\theta_c, \tilde{b}_y) - L(\theta_c, e_y) + \omega_c L(\tilde{g}, e_y) - \omega_c L(\tilde{g}, \tilde{b}_y) \right] + \dots \\
& + L(\theta_y, e_c) \left[+ k_c \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) \left(L(\tilde{h}, e_y) - L(\tilde{h}, \tilde{b}_y) \right) \right]
\end{aligned}$$

La matriz es Hurwitz si el determinante es positivo, esto significa

$$\begin{aligned}
& \left[k_y \left(\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y) \right) - L(\theta_y, e_y) \right] \dots \\
& \dots \left[k_c \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) - \left(L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c) \right) \right] \\
& > \\
& - L(\theta_y, e_c) \left[L(\theta_c, \tilde{b}_y) - L(\theta_c, e_y) + \omega_c L(\tilde{g}, e_y) - \omega_c L(\tilde{g}, \tilde{b}_y) \right] + \dots \\
& - L(\theta_y, e_c) \left[+ k_c \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) \left(L(\tilde{h}, e_y) - L(\tilde{h}, \tilde{b}_y) \right) \right]
\end{aligned}$$

o bien

$$\begin{aligned}
k_y &> \frac{L(\theta_y, e_y)}{\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y)} + \dots \\
&\frac{L(\theta_y, e_c) \left[L(\theta_c, \tilde{b}_y) - L(\theta_c, e_y) + \omega_c L(\tilde{g}, e_y) - \omega_c L(\tilde{g}, \tilde{b}_y) \right]}{k_c \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) - (L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c))} \\
&\frac{L(\theta_y, e_c) \left[k_c \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) \left(L(\tilde{h}, e_y) - L(\tilde{h}, \tilde{b}_y) \right) \right]}{k_c \left(\omega_c \left[1 - L(\tilde{g}, \tilde{b}_c) \right] + L(\theta_c, \tilde{b}_c) \right) - (L(\theta_c, e_c) - \omega_c L(\tilde{g}, e_c))}
\end{aligned}$$

que son las condiciones mostradas en la prueba.

Apéndice F

Deducción de condiciones de estabilidad para el caso no monótono

Se parte de la dinámica de error a lazo cerrado

$$\begin{aligned}\dot{e}_y &= -A_y e_y - \tilde{b}_y \\ \dot{\tilde{b}}_y &= -\Omega_y \tilde{b}_y - \theta_y(e, b_y, d_a, \dot{d}_a) \\ \dot{e}_c &= -k_c e_c - \lambda_\epsilon(e_c, e_y, \varepsilon_c, \tilde{b}_y, d_a) + h(e_y, \tilde{b}_y) \\ \dot{\varepsilon}_c &= -\lambda_\epsilon(e_c, e_V, \varepsilon_c, \tilde{b}_y, d_a) + h(e_y, \tilde{b}_y)\end{aligned}$$

Esta dinámica se puede acotar utilizando el Lemma de Gronwall

$$\begin{aligned}
\|\dot{e}_y\| &\leq -k_y \|e_y\| - \|\tilde{b}_y\| \\
\|\dot{\tilde{b}}_y\| &\leq -\omega_y \|\tilde{b}_y\| - L(\theta_y, e_c) \|e_c\| - L(\theta_y, e_y) \|e_y\| - L(\theta_y, \tilde{b}_y) \|\tilde{b}_y\| \\
\|\dot{e}_c\| &\leq -k_c \|e_c\| - L(\lambda_e, e_c) \|e_c\| - L(\lambda_e, e_y) \|e_y\| + \dots \\
&\quad -L(\lambda_e, \tilde{b}_y) \|\tilde{b}_y\| - L(\lambda_e, \epsilon_c) \|\epsilon_c\| + \dots \\
&\quad +L(h, e_y) \|e_y\| + L(h, \tilde{b}_y) \|\tilde{b}_y\| \\
\|\dot{\epsilon}_c\| &\leq -L(\lambda_\epsilon, e_c) \|e_c\| - L(\lambda_\epsilon, e_y) \|e_y\| + \dots \\
&\quad -L(\lambda_\epsilon, \tilde{b}_y) \|\tilde{b}_y\| - L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c) \|\epsilon_c\| + \dots \\
&\quad -L(h, e_y) \|e_y\| - L(h, \tilde{b}_y) \|\tilde{b}_y\|
\end{aligned}$$

o en forma equivalente:

$$\begin{bmatrix} \|\dot{e}_y\| \\ \|\dot{\tilde{b}}_y\| \\ \|\dot{e}_c\| \\ \|\dot{\epsilon}_c\| \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} -k_y & -1 & 0 & 0 \\ -L(\theta_y, e_y) & -\omega_y + \dots & -L(\theta_y, e_c) & 0 \\ L(h, e_y) + \dots & L(h, \tilde{b}_y) + \dots & -k_c + \dots & -L(\lambda_e, \epsilon_c) \\ -L(\lambda_e, e_y) & -L(\lambda_e, \tilde{b}_y) & -L(\lambda_e, e_c) & -L(\lambda_e, \epsilon_c) \\ -L(\lambda_\epsilon, e_y) + \dots & -L(\lambda_\epsilon, \tilde{b}_y) + \dots & -L(\lambda_\epsilon, e_c) & -L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c) \\ -L(h, e_y) & -L(h, \tilde{b}_y) & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|e_y\| \\ \|\tilde{b}_y\| \\ \|e_c\| \\ \|\epsilon_c\| \end{bmatrix}$$

donde k_y (o ω_y) es el eigenvalor dominante de la matriz A_y (o Ω_y).

Analizando por separado la dinámica del subsistema de 2×2 de concentración se tiene

$$\begin{bmatrix} \|\dot{e}_c\| \\ \|\dot{\epsilon}_c\| \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} -k_c - L(\lambda_e, e_c) & -L(\lambda_e, \epsilon_c) \\ -L(\lambda_\epsilon, e_c) & -L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|e_c\| \\ \|\epsilon_c\| \end{bmatrix}$$

La dinámica es estable si la matriz $-A$ es Hurwitz

$$-A = \begin{bmatrix} k_c + L(\lambda_e, e_c) & L(\lambda_e, \epsilon_c) \\ L(\lambda_\epsilon, e_c) & L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c) \end{bmatrix}$$

Para que esta matriz sea Hurwitz, los elementos de la diagonal principal y el determinante deben ser positivos, es decir

$$\begin{aligned}
k_c + L(\lambda_e, e_c) &> 0 \\
L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c) &> 0 \\
(k_c + L(\lambda_e, e_c)) L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c) - L(\lambda_\epsilon, e_c) L(\lambda_e, \epsilon_c) &> 0
\end{aligned}$$

lo que resulta en las condiciones de estabilidad de la dinámica de concentración

$$\begin{aligned} k_c &> -L(\lambda_e, e_c) \\ L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c) &> 0 \\ k_c &> -L(\lambda_e, e_c) + \frac{L(\lambda_\epsilon, e_c)L(\lambda_e, \epsilon_c)}{L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c)} \end{aligned}$$

Las condiciones de la dinámica de temperatura-volumen son las mismas puesto que el sub-sistema 2×2 es el mismo. Finalmente, la matriz $-A$ de 4×4 del sistema completo es

$$\begin{bmatrix} k_y & 1 & 0 & 0 \\ L(\theta_y, e_y) & \omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y) & L(\theta_y, e_c) & 0 \\ L(\lambda_\epsilon, e_y) - L(h, e_y) & L(\lambda_\epsilon, \tilde{b}_y) - L(h, \tilde{b}_y) & k_c + L(\lambda_e, e_c) & L(\lambda_e, \epsilon_c) \\ L(\lambda_\epsilon, e_y) + L(h, e_y) & L(\lambda_\epsilon, \tilde{b}_y) + L(h, \tilde{b}_y) & L(\lambda_\epsilon, e_c) & L(\lambda_e, \epsilon_c) \end{bmatrix}$$

cuyo determinante es

$$\begin{aligned} &k_y \begin{vmatrix} \omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y) & L(\theta_y, e_c) & 0 \\ L(\lambda_\epsilon, \tilde{b}_y) - L(h, \tilde{b}_y) & k_c + L(\lambda_e, e_c) & L(\lambda_e, \epsilon_c) \\ L(\lambda_\epsilon, \tilde{b}_y) + L(h, \tilde{b}_y) & L(\lambda_\epsilon, e_c) & L(\lambda_e, \epsilon_c) \end{vmatrix} + \dots \\ &- \begin{vmatrix} L(\theta_y, e_y) & L(\theta_y, e_c) & 0 \\ L(\lambda_\epsilon, e_y) - L(h, e_y) & k_c + L(\lambda_e, e_c) & L(\lambda_e, \epsilon_c) \\ L(\lambda_\epsilon, e_y) + L(h, e_y) & L(\lambda_\epsilon, e_c) & L(\lambda_e, \epsilon_c) \end{vmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &k_y \left[(k_c + L(\lambda_e, e_c)) (\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y)) L(\lambda_e, \epsilon_c) \right] + \dots \\ &k_y \left[(L(\lambda_\epsilon, \tilde{b}_y) + L(h, \tilde{b}_y)) L(\theta_y, e_c) L(\lambda_e, \epsilon_c) \right] + \dots \\ &+ k_y \left[- (\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y)) L(\lambda_\epsilon, e_c) L(\lambda_e, \epsilon_c) - (L(\lambda_\epsilon, \tilde{b}_y) - L(h, \tilde{b}_y)) L(\theta_y, e_c) L(\lambda_e, \epsilon_c) \right] + \dots \\ &- [(k_c + L(\lambda_e, e_c)) L(\theta_y, e_y) L(\lambda_e, \epsilon_c) + (L(\lambda_\epsilon, e_y) + L(h, e_y)) L(\theta_y, e_c) L(\lambda_e, \epsilon_c)] + \dots \\ &- [-L(\lambda_\epsilon, e_c) L(\theta_y, e_c) L(\lambda_e, \epsilon_c) - (L(\lambda_\epsilon, e_y) - L(h, e_y)) L(\lambda_e, \epsilon_c) L(\theta_y, e_c)] \end{aligned}$$

simplificando

$$\begin{aligned} &\left[k_y (\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y)) - L(\theta_y, e_y) \right] [(k_c + L(\lambda_e, e_c)) L(\lambda_e, \epsilon_c) - L(\lambda_\epsilon, e_c) L(\lambda_e, \epsilon_c)] + \dots \\ &+ L(\theta_y, e_c) \left\{ L(\lambda_e, \epsilon_c) \left[L(\lambda_\epsilon, \tilde{b}_y) + L(\lambda_\epsilon, e_y) + L(h, \tilde{b}_y) + L(h, e_y) \right] \right\} + \dots \\ &- L(\theta_y, e_c) \left\{ -L(\lambda_\epsilon, \epsilon_c) \left[L(\lambda_\epsilon, \tilde{b}_y) + L(\lambda_\epsilon, e_y) - L(h, e_y) - L(h, \tilde{b}_y) \right] \right\} \end{aligned}$$

y definiendo

$$\begin{aligned} L(\lambda_e, \tilde{b}_y e_y) &= L(\lambda_e, \tilde{b}_y) + L(\lambda_e, e_y) \\ L(\lambda_e, \tilde{b}_y e_y) &= L(\lambda_e, \tilde{b}_y) + L(\lambda_e, e_y) \\ L(h, \tilde{b}_y e_y) &= L(h, \tilde{b}_y) + L(h, e_y) \end{aligned}$$

se puede escribir como

$$\begin{aligned} &\left[k_y \left(\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y) \right) - L(\theta_y, e_y) \right] \left[(k_c + L(\lambda_e, e_c)) L(\lambda_e, \epsilon_c) - L(\lambda_e, e_c) L(\lambda_e, \epsilon_c) \right] \\ &+ L(\theta_y, e_c) \left[L(\lambda_e, \epsilon_c) \left(L(\lambda_e, \tilde{b}_y e_y) + L(h, \tilde{b}_y e_y) \right) - L_{\epsilon_c}^{\lambda_e} \left(L(\lambda_e, \tilde{b}_y e_y) - L(h, \tilde{b}_y e_y) \right) \right] \end{aligned}$$

La matriz $-A$ es Hurwitz si el determinante es positivo, esto significa

$$\begin{aligned} &\left[k_y \left(\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y) \right) - L(\theta_y, e_y) \right] \left[(k_c + L(\lambda_e, e_c)) L(\lambda_e, \epsilon_c) - L(\lambda_e, e_c) L(\lambda_e, \epsilon_c) \right] > \\ &L(\theta_y, e_c) \left[L(\lambda_e, \epsilon_c) \left(L(\lambda_e, \tilde{b}_y e_y) - L(h, \tilde{b}_y e_y) \right) - L(\lambda_e, \epsilon_c) \left(L(\lambda_e, \tilde{b}_y e_y) + L(h, \tilde{b}_y e_y) \right) \right] \end{aligned}$$

o bien

$$\begin{aligned} k_y &> \frac{L(\theta_y, e_y)}{\omega_y + L(\theta_y, \tilde{b}_y)} + \dots \\ &- \frac{L(\theta_y, e_c) \left[L(\lambda_e, \epsilon_c) \left(L(\lambda_e, \tilde{b}_y e_y) + L(h, \tilde{b}_y e_y) \right) \right]}{(k_c + L_{\epsilon_c}^{\lambda_e}) L(\lambda_e, \epsilon_c) - L(\lambda_e, e_c) L(\lambda_e, \epsilon_c)} + \dots \\ &\frac{L(\theta_y, e_c) \left[L(\lambda_e, \epsilon_c) \left(L(\lambda_e, \tilde{b}_y e_y) - L(h, \tilde{b}_y e_y) \right) \right]}{(k_c + L_{\epsilon_c}^{\lambda_e}) L(\lambda_e, \epsilon_c) - L(\lambda_e, e_c) L(\lambda_e, \epsilon_c)} \end{aligned}$$

que son las condiciones mostradas en la prueba.

Apéndice G

Deducción del control propuesto en la forma de bloques PI e I para el caso monótono

G.1 Cálculo del control de volumen en la forma PI

Se parte de las ecuaciones de control de volumen:

$$\begin{aligned} & \bullet \text{ Control de volumen} & (G.1) \\ \dot{\chi}_V &= -\omega_V \chi_V - \omega_V (\omega_V y_V - a_V q) \\ q &= \frac{k_V (y_V - \bar{y}_V) + \omega_V y_V + \chi_V}{a_V} \end{aligned}$$

sustituyendo el control q en $\dot{\chi}_V$

$$\begin{aligned} \dot{\chi}_V &= -\omega_V \chi_V - \omega_V^2 y_V + a_V \omega_V \left[\frac{k_V (y_V - \bar{y}_V) + \omega_V y_V + \chi_V}{a_V} \right] \\ \dot{\chi}_V &= -\omega_V \chi_V - \omega_V^2 y_V + \omega_V k_V (y_V - \bar{y}_V) + \omega_V^2 y_V + \omega_V \chi_V \\ \dot{\chi}_V &= \omega_V k_V (y_V - \bar{y}_V) \end{aligned}$$

Se definen

$$\begin{aligned}\tilde{\chi}_V &= \chi_V - \bar{\chi}_V \\ v_q &= q - \bar{q} \\ \psi_V &= y_V - \bar{y}_V\end{aligned}$$

el valor nominal \bar{q} es el que se logra cuando la dinámica de volumen llega a su estado permanente

$$\begin{aligned}0 &= \dot{V} = -a_V \bar{q} + \bar{b}_V \\ a_V \bar{q} &= \bar{b}_V \\ a_V \bar{q} &= \bar{b}_V\end{aligned}$$

recordando que por definición

$$\hat{b}_V = \chi_V + \omega_V y_V$$

por lo tanto en estado permanente:

$$\bar{b}_V = \bar{\chi}_V + \omega_V \bar{y}_V$$

y el valor nominal \bar{q} es

$$\bar{q} = \frac{\omega_V \bar{y}_V + \bar{\chi}_V}{a_V} \quad (\text{G.2})$$

Por otro lado, la derivada temporal de la nueva variable $\tilde{\chi}_V$ es:

$$\dot{\tilde{\chi}}_V = \dot{\chi}_V = k_V \omega_V (y_V - \bar{y}_V)$$

por lo tanto al integrar esta última ecuación

$$\tilde{\chi}_V = k_V \omega_V \int_0^t (y_V - \bar{y}_V) dt = k_V \omega_V \int_0^t \psi_V dt \quad (\text{G.3})$$

reescribiendo el control q en función de variables de desviación y sustituyendo (G.2) y (G.3):

$$\begin{aligned}
q &= \frac{k_V(y_V - \bar{y}_V) + \omega_V y_V + \chi_V}{a_V} \\
q &= \frac{k_V \psi_V + \omega_V(\psi_V + \bar{y}_V) + (\tilde{\chi}_V + \bar{\chi}_V)}{a_V} \\
q &= \frac{\omega_V \bar{y}_V + \bar{\chi}_V}{a_V} + \frac{(k_V + \omega_V)\psi_V + k_V \omega_V \int_0^t \psi_V dt}{a_V} \\
q &= \bar{q} + \frac{(k_V + \omega_V)\psi_V + k_V \omega_V \int_0^t \psi_V dt}{a_V} \\
q - \bar{q} &= \frac{(k_V + \omega_V)\psi_V + k_V \omega_V \int_0^t \psi_V dt}{a_V} \\
v_q &= \frac{(k_V + \omega_V)\psi_V + k_V \omega_V \int_0^t \psi_V dt}{a_V}
\end{aligned}$$

Se definen las siguientes constantes:

$$\begin{aligned}
\kappa_V &= \frac{k_V + \omega_V}{a_V} \\
t_V &= k_V^{-1} + \omega_V^{-1}
\end{aligned}$$

tal que:

$$\kappa_V t_V^{-1} = \frac{k_V + \omega_V}{a_V} \frac{k_V \omega_V}{k_V + \omega_V} = \frac{k_V \omega_V}{a_V}$$

por lo que el control se puede escribir como:

$$v_q = \kappa_V \psi_V + t_V^{-1} \int_0^t \psi_V dt$$

finalmente se define un componente de control PI como:

$$PI_V(\psi_V) = \kappa_V \psi_V + t_V^{-1} \int_0^t \psi_V dt$$

por lo tanto:

$$v_q = PI_V(\psi_V)$$

G.2 Cálculo del control de concentración en la forma PI

Se parte de las ecuaciones de control de concentración:

$$\begin{aligned}
 & \bullet \text{ Control de concentración} & (G.4) \\
 \dot{\chi}_c &= -\omega_c \chi_c - \omega_c (\omega_c \hat{y}_c + a_c q_e) \\
 q_e &= -\frac{k_c(\hat{y}_c - \bar{y}_c) + \omega_c \hat{y}_c + \chi_c}{a_c} \\
 \hat{y}_c &= h(y, \chi_h, u_h, w)
 \end{aligned}$$

sustituyendo el control q_e en $\dot{\chi}_c$

$$\begin{aligned}
 \dot{\chi}_c &= -\omega_c \chi_c - \omega_c^2 \hat{y}_c - a_c \omega_c q_e \\
 \dot{\chi}_c &= -\omega_c \chi_c - \omega_c^2 \hat{y}_c + a_c \omega_c \left(\frac{k_c(\hat{y}_c - \bar{y}_c) + \omega_c \hat{y}_c + \chi_c}{a_c} \right) \\
 \dot{\chi}_c &= -\omega_c \chi_c - \omega_c^2 \hat{y}_c + k_c \omega_c (\hat{y}_c - \bar{y}_c) + \omega_c^2 \hat{y}_c + \omega_c \chi_c \\
 \dot{\chi}_c &= k_c \omega_c (\hat{y}_c - \bar{y}_c)
 \end{aligned}$$

Se definen

$$\begin{aligned}
 \tilde{\chi}_c &= \chi_c - \bar{\chi}_c \\
 v_{q_e} &= q_e - \bar{q}_e \\
 \hat{\psi}_c &= \hat{y}_c - \bar{y}_c
 \end{aligned}$$

el valor nominal \bar{q}_e es el que se logra cuando la dinámica de concentración llega a su estado permanente

$$\begin{aligned}
 0 &= \dot{c} = a_c \bar{q}_e + \bar{b}_c \\
 a_c \bar{q}_e &= -\bar{b}_c
 \end{aligned}$$

recordando que por definición

$$\hat{b}_c = \chi_c + \omega_c \hat{y}_c$$

por lo tanto en estado permanente:

$$\bar{b}_c = \bar{\chi}_c + \omega_c \bar{y}_c$$

y el valor nominal \bar{q}_e es

$$\bar{q}_e = - \left[\frac{\omega_c \bar{y}_c + \bar{\chi}_c}{a_c} \right] \quad (\text{G.5})$$

Por otro lado, la derivada temporal de la variable $\tilde{\chi}_c$ es:

$$\dot{\tilde{\chi}}_c = \dot{\chi}_c = k_c \omega_c (\hat{y}_c - \bar{y}_c)$$

por lo tanto al integrar esta última ecuación

$$\tilde{\chi}_c = k_c \omega_c \int_0^t (\hat{y}_c - \bar{y}_c) dt = k_c \omega_c \int_0^t \hat{\psi}_c dt$$

reescribiendo el control q_e en función de variables de desviación y sustituyendo (G.2) y (G.3):

$$\begin{aligned} q_e &= - \left[\frac{k_c (\hat{y}_c - \bar{y}_c) + \omega_c \hat{y}_c + \chi_c}{a_c} \right] \\ q_e &= - \left[\frac{k_c \hat{\psi}_c + \omega_c (\hat{\psi}_c + \bar{y}_c) + (\tilde{\chi}_c + \bar{\chi}_c)}{a_c} \right] \\ q_e &= - \left[\frac{\omega_c \bar{y}_c + \bar{\chi}_c}{a_c} + \frac{(k_c + \omega_c) \hat{\psi}_c + k_c \omega_c \int_0^t \hat{\psi}_c dt}{a_c} \right] \\ q_e &= - \left[\frac{\omega_c \bar{y}_c + \bar{\chi}_c}{a_c} \right] - \left[\frac{(k_c + \omega_c) \hat{\psi}_c + k_c \omega_c \int_0^t \hat{\psi}_c dt}{a_c} \right] \\ q_e &= \bar{q}_e - \left[\frac{(k_c + \omega_c) \hat{\psi}_c + k_c \omega_c \int_0^t \hat{\psi}_c dt}{a_c} \right] \\ q_e - \bar{q}_e &= - \left[\frac{(k_c + \omega_c) \hat{\psi}_c + k_c \omega_c \int_0^t \hat{\psi}_c dt}{a_c} \right] \\ v_{q_e} &= - \left[\frac{(k_c + \omega_c) \dot{\hat{\psi}}_c + k_c \omega_c \dot{\hat{\psi}}_c}{a_c} \right] \end{aligned}$$

Se definen las siguientes constantes:

$$\begin{aligned}\kappa_c &= -\frac{k_c + \omega_c}{a_c} \\ t_c &= k_c^{-1} + \omega_c^{-1}\end{aligned}$$

tal que

$$\kappa_c t_c^{-1} = -\frac{k_c + \omega_c}{a_c} \frac{k_c \omega_c}{k_c + \omega_c} = -\frac{k_c \omega_c}{a_c}$$

por lo que el control se puede escribir como

$$v_{qe} = \kappa_c \hat{\psi}_c + t_c^{-1} \int_0^t \hat{\psi}_c dt$$

finalmente se define un componente de control PI como

$$PI_c(\hat{\psi}_c) = \kappa_c \hat{\psi}_c + t_c^{-1} \int_0^t \hat{\psi}_c dt$$

por lo tanto

$$v_{qe} = PI_c(\hat{\psi}_c)$$

La función sensor por “software”:

$$\hat{y}_c = h(y, \chi_h, u_h, w)$$

se reescribe utilizando las siguientes variables de desviación:

$$\begin{aligned}\psi &= y - \bar{y} \\ \tilde{\chi}_h &= \chi_h - \bar{\chi}_h \\ v_h &= u_h - \bar{u}_h \\ \tilde{w} &= w - \bar{w}\end{aligned}$$

donde:

$$\begin{aligned}
y &= [y_V, y_j, y_T]^T \\
u_h &= [q_j, q_e]^T \\
w &= [T_e, T_{je}]^T \\
\chi_h &= [\chi_j, \chi_T]^T
\end{aligned}$$

como:

$$\hat{y}_c = h(\psi + \bar{y}, \tilde{\chi}_h + \bar{\chi}_h, v_h + \bar{u}_h, \tilde{w} + \bar{w})$$

por lo tanto:

$$\begin{aligned}
\hat{\psi}_c &= \hat{y}_c - \bar{y}_c \\
\hat{\psi}_c &= h(\psi + \bar{y}, \tilde{\chi}_h + \bar{\chi}_h, v_h + \bar{u}_h, \tilde{w} + \bar{w}) - \bar{y}_c \\
\hat{\psi}_c &= \varphi_c(\tilde{\chi}_h, \psi, v_h, \tilde{w})
\end{aligned}$$

G.3 Cálculo del control primario de temperatura en la forma PI

Se parte de las ecuaciones de control primario de temperatura:

$$\begin{aligned}
&\bullet \text{ Control de temperatura} && \text{(G.6)} \\
\dot{\chi}_T &= -\omega_T \chi_T - \omega_T (\omega_T y_T + a_T y_j) \\
T_j^* &= - \left[\frac{k_T (y_T - \bar{y}_T) + \omega_T y_T + \chi_T}{a_T} \right]
\end{aligned}$$

sustituyendo $y_j = e_j^* + T_j^*$ en $\dot{\chi}_T$:

$$\dot{\chi}_T = -\omega_T \chi_T - \omega_T^2 y_T - a_T \omega_T (e_j^* + T_j^*)$$

y sustituyendo el control T_j^* en $\dot{\chi}_T$

$$\begin{aligned}
\dot{\chi}_T &= -\omega_T \chi_T - \omega_T^2 y_T - a_T \omega_T e_j^* - a_T \omega_T T_j^* \\
\dot{\chi}_T &= -\omega_T \chi_T - \omega_T^2 y_T - a_T \omega_T e_j^* + \omega_T [k_T (y_T - \bar{y}_T) + \omega_T y_T + \chi_T] \\
\dot{\chi}_T &= -\omega_T \chi_T - \omega_T^2 y_T - a_T \omega_T e_j^* + \omega_T k_T (y_T - \bar{y}_T) + \omega_T^2 y_T + \omega_T \chi_T \\
\dot{\chi}_T &= -a_T \omega_T e_j^* + \omega_T k_T (y_T - \bar{y}_T)
\end{aligned}$$

Se definen

$$\begin{aligned}\tilde{\chi}_T &= \chi_T - \bar{\chi}_T \\ v_q &= q - \bar{q} \\ \psi_T &= y_T - \bar{y}_T \\ \psi_j &= y_j - \bar{y}_j\end{aligned}$$

el valor nominal \bar{y}_j es el que se logra cuando la dinámica de volumen llega a su estado permanente

$$\begin{aligned}0 &= \dot{T} = a_T \bar{y}_j + \bar{b}_T \\ a_T \bar{y}_j &= -\bar{b}_T\end{aligned}$$

recordando que por definición

$$\hat{b}_T = \chi_T + \omega_T y_T$$

por lo tanto en estado permanente:

$$\bar{b}_T = \bar{\chi}_T + \omega_T \bar{y}_T$$

y el valor nominal \bar{y}_j es

$$\bar{y}_j = - \left[\frac{\omega_T \bar{y}_T + \bar{\chi}_T}{a_T} \right]$$

Por otro lado, la derivada temporal de la variable $\tilde{\chi}_T$ es:

$$\dot{\tilde{\chi}}_T = \dot{\chi}_T = -a_T \omega_T e_j^* + \omega_T k_T \psi_T$$

por lo tanto al integrar esta ultima ecuación

$$\tilde{\chi}_T = -a_T \omega_T \int_0^t e_j^* dt + k_T \omega_T \int_0^t \psi_T dt \quad (\text{G.7})$$

reescribiendo el control T_j^* en funcion de variables de desviacion y sustituyendo (G.2) y (G.3):

$$\begin{aligned}
T_j^* &= - \left[\frac{k_T(y_T - \bar{y}_T) + \omega_T y_T + \chi_T}{a_T} \right] \\
T_j^* &= - \left[\frac{k_T \psi_T + \omega_T(\psi_T + \bar{y}_T) + (\tilde{\chi}_T + \bar{\chi}_T)}{a_T} \right] \\
T_j^* &= - \left[\frac{\omega_T \bar{y}_T + \bar{\chi}_T}{a_T} \right] - \left[\frac{(k_T + \omega_T)\psi_T + \tilde{\chi}_T}{a_T} \right] \\
T_j^* &= \bar{y}_j - \left[\frac{(k_T + \omega_T)\psi_T - a_T \omega_T \int_0^t e_j^* dt + k_T \omega_T \int_0^t \psi_T dt}{a_T} \right] \\
T_j^* - \bar{y}_j &= - \left[\frac{(k_T + \omega_T)\psi_T + k_T \omega_T \int_0^t \psi_T dt}{a_T} \right] + \omega_T \int_0^t e_j^* dt \\
\tau^* &= - \left[\frac{(k_T + \omega_T)\psi_T + k_T \omega_T \int_0^t \psi_T dt}{a_T} \right] + \omega_T \int_0^t e_j^* dt
\end{aligned}$$

Se definen las siguientes constantes:

$$\begin{aligned}
\kappa_T &= -\frac{k_T + \omega_T}{a_T} \\
t_T &= k_T^{-1} + \omega_T^{-1}
\end{aligned}$$

tal que:

$$\kappa_T t_T^{-1} = -\frac{k_T + \omega_T}{a_T} \frac{k_T \omega_T}{k_T + \omega_T} = -\frac{k_T \omega_T}{a_T}$$

por lo que el control se puede escribir como

$$\tau^* = - \left[\kappa_T \psi_T + t_T^{-1} \int_0^t \psi_T dt \right] + \omega_T \int_0^t e_j^* dt$$

finalmente se define un componente de control PI como

$$PI_T(\psi_T) = \kappa_T \psi_T + t_T^{-1} \int_0^t \psi_T dt$$

y otra componente de control integral I como

$$I_j^b(e_j^*) = \omega_T \int_0^t e_j^* dt$$

Ahora bien, por definición

$$\begin{aligned} e_j^* &= y_j - T_j^* \\ \psi_j &= y_j - \bar{y}_j \\ \tau^* &= T_j^* - \bar{y}_j \end{aligned}$$

e_j^* se puede escribir como

$$\begin{aligned} e_j^* &= \psi_j + \bar{y}_j - \tau^* - \bar{y}_j \\ e_j^* &= \psi_j - \tau^* \end{aligned}$$

y el componente de control integral I_j^b como

$$I_j^b(\psi_j - \tau^*) = \omega_T \int_0^t (\psi_j - \tau^*) dt$$

por lo tanto la señal de control

$$\tau^* = -PI_T(\psi_T) + I_j^b(\psi_j - \tau^*)$$

G.4 Cálculo del control secundario de temperatura en la forma PI

Se parte de las ecuaciones de control secundario de temperatura:

$$\begin{aligned} \dot{\chi}_j &= -\omega_j \chi_j - \omega_j (\omega_j y_j - a_j q_j) \\ q_j &= \frac{k_j (y_j - T_j^*) + \omega_j y_j + a_T (y_T - \bar{y}_T) - \dot{T}_j^* + \chi_j}{a_j} \\ \dot{T}_j^* &= -k_T y_j - \frac{k_T}{a_T} (\omega_T y_T + \chi_T) \end{aligned} \tag{G.8}$$

y sustituyendo el control q_j en $\dot{\chi}_j$

$$\begin{aligned}
\dot{\chi}_j &= -\omega_j \chi_j - \omega_j^2 y_j + a_j \omega_j q_j \\
\dot{\chi}_j &= -\omega_j \chi_j - \omega_j^2 y_j + a_j \omega_j \left[\frac{k_j (y_j - T_j^*) + \omega_j y_j + a_T (y_T - \bar{y}_T) - \dot{T}_j^* + \chi_j}{a_j} \right] \\
\dot{\chi}_j &= -\omega_j \chi_j - \omega_j^2 y_j + \omega_j \left[k_j (y_j - T_j^*) + \omega_j y_j + a_T (y_T - \bar{y}_T) - \dot{T}_j^* + \chi_j \right] \\
\dot{\chi}_j &= -\omega_j \chi_j - \omega_j^2 y_j + k_j \omega_j (y_j - T_j^*) + \omega_j^2 y_j + a_T \omega_j (y_T - \bar{y}_T) - \omega_j \dot{T}_j^* + \omega_j \chi_j \\
\dot{\chi}_j &= k_j \omega_j (y_j - T_j^*) + a_T \omega_j (y_T - \bar{y}_T) - \omega_j \dot{T}_j^* \\
\dot{\chi}_j &= k_j \omega_j (y_j - T_j^*) + a_T \omega_j \psi_T - \omega_j \dot{T}_j^*
\end{aligned}$$

como: $y_j - T_j^* = e_j^*$

$$\dot{\chi}_j = k_j \omega_j e_j^* + a_T \omega_j \psi_T - \omega_j \dot{T}_j^*$$

Se definen

$$\begin{aligned}
\tilde{\chi}_j &= \chi_j - \bar{\chi}_j \\
v_{q_j} &= q_j - \bar{q}_j \\
\psi_j &= y_j - \bar{y}_j
\end{aligned}$$

el valor nominal \bar{q}_j es el que se logra cuando la dinámica de volumen llega a su estado permanente

$$\begin{aligned}
0 &= \dot{T}_j = -a_j q_j + b_j \\
a_j \bar{q}_j &= \bar{b}_j
\end{aligned}$$

recordando que por definición

$$\hat{b}_j = \chi_j + \omega_j y_j$$

por lo tanto en estado permanente

$$\bar{b}_j = \bar{\chi}_j + \omega_j \bar{y}_j$$

y el valor nominal \bar{q}_j es

$$\bar{q}_j = \frac{\omega_j \bar{y}_j + \bar{\chi}_j}{a_j}$$

Por otro lado, la derivada temporal de la variable $\tilde{\chi}_j$ es

$$\dot{\tilde{\chi}}_j = \dot{\chi}_j = k_j \omega_j e_j^* + a_T \omega_j \psi_T - \omega_j \dot{T}_j^*$$

por lo tanto al integrar esta ultima ecuación

$$\tilde{\chi}_j = k_j \omega_j \int_0^t e_j^* dt + a_T \omega_j \int_0^t \psi_T dt - \omega_j \int_0^t \dot{T}_j^* dt \quad (\text{G.9})$$

$$\tilde{\chi}_j = k_j \omega_j \int_0^t e_j^* dt + a_T \omega_j \int_0^t \psi_T dt - \omega_j T_j^* \quad (\text{G.10})$$

reescribiendo el control q_j en función de variables de desviación y sustituyendo (G.2) y (G.3):

$$\begin{aligned}
q_j &= \frac{k_j e_j^* + \omega_j y_j + a_T (y_T - \bar{y}_T) - \dot{T}_j^* + \chi_j}{a_j} \\
q_j &= \frac{k_j e_j^* + \omega_j (\psi_j + \bar{y}_j) + a_T \psi_T - \dot{T}_j^* + (\tilde{\chi}_j + \bar{\chi}_j)}{a_j} \\
q_j &= \frac{k_j e_j^* + \omega_j \psi_j + \omega_j \bar{y}_j + a_T \psi_T - \dot{T}_j^* + \tilde{\chi}_j + \bar{\chi}_j}{a_j} \\
q_j &= \frac{\omega_j \bar{y}_j + \bar{\chi}_j}{a_j} + \frac{k_j e_j^* + \omega_j \psi_j + a_T \psi_T - \dot{T}_j^* + \tilde{\chi}_j}{a_j} \\
q_j - \bar{q}_j &= \frac{k_j e_j^* + \omega_j \psi_j + a_T \psi_T + k_j \omega_j \int_0^t e_j^* dt + a_T \omega_j \int_0^t \psi_T dt - \omega_j T_j^* - \dot{T}_j^*}{a_j} \\
v_{q_j} &= \frac{k_j e_j^* + k_j \omega_j \int_0^t e_j^* dt + \omega_j \psi_j + a_T \psi_T + a_T \omega_j \int_0^t \psi_T dt - \omega_j T_j^* - \dot{T}_j^*}{a_j} \\
v_{q_j} &= \frac{k_j (\psi_j - \tau^*) + k_j \omega_j \int_0^t (\psi_j - \tau^*) dt + \omega_j (\psi_j - \tau^*)}{a_j} + \dots \\
&\quad + \frac{+\omega_j T_j^* + a_T \psi_T + a_T \omega_j \int_0^t \psi_T dt - \omega_j T_j^* - \dot{T}_j^*}{a_j} \\
v_{q_j} &= \frac{(k_j + \omega_j) (\psi_j - \tau^*) + k_j \omega_j \int_0^t (\psi_j - \tau^*) dt}{a_j} + \dots \\
&\quad + \frac{a_T \psi_T + a_T \omega_j \int_0^t \psi_T dt}{a_j} - \frac{\dot{T}_j^*}{a_j}
\end{aligned}$$

como la derivada temporal de τ^* es:

$$\dot{\tau}^* = \dot{T}_j^*$$

el control se puede escribir como

$$\begin{aligned}
v_{q_j} &= \frac{(k_j + \omega_j) (\psi_j - \tau^*) + k_j \omega_j \int_0^t (\psi_j - \tau^*) dt}{a_j} + \dots \\
&\quad + \frac{a_T \psi_T + a_T \omega_j \int_0^t \psi_T dt}{a_j} - \frac{\dot{\tau}^*}{a_j}
\end{aligned}$$

Se definen las siguientes constantes

$$\begin{aligned}\kappa_j &= \frac{k_j + \omega_j}{a_j} \\ t_T &= k_j^{-1} + \omega_j^{-1}\end{aligned}$$

tal que

$$\kappa_j t_j^{-1} = \frac{k_j + \omega_j}{a_j} \frac{k_j \omega_j}{k_j + \omega_j} = \frac{k_j \omega_j}{a_j}$$

por lo que el primer componente del control secundario se puede escribir como

$$\frac{(k_j + \omega_j)(\psi_j - \tau^*) + k_j \omega_j \int_0^t (\psi_j - \tau^*) dt}{a_j} = \kappa_j (\psi_j - \tau^*) + t_j^{-1} \int_0^t (\psi_j - \tau^*) dt$$

se define un componente de control PI como

$$PI_j(\psi_j - \tau^*) = \kappa_T (\psi_j - \tau^*) + t_T^{-1} \int_0^t (\psi_j - \tau^*) dt$$

y se define un segundo componente de control PI como

$$PI_T^b(\psi_T) = \frac{a_T}{a_j} \left[\psi_T + \omega_j \int_0^t \psi_T dt \right]$$

Para el calculo de la derivada del set point, por definición

$$\dot{T}_j^* = -k_T y_j - \frac{k_T}{a_T} (\omega_T y_T + \chi_T)$$

recordando que

$$\begin{aligned}
\dot{\tau}^* &= \dot{T}_j^* \\
\dot{\tau}^* &= -k_T y_j - \frac{k_T \omega_T}{a_T} y_T - \frac{k_T}{a_T} \chi_T \\
\dot{\tau}^* &= -k_T (\psi_j + \bar{y}_j) - \frac{k_T \omega_T}{a_T} (\psi_T + \bar{y}_T) - \frac{k_T}{a_T} (\tilde{\chi}_T + \bar{\chi}_T) \\
\dot{\tau}^* &= k_T \left(\frac{-\omega_T \bar{y}_T - \bar{\chi}_T}{a_T} \right) - k_T \bar{y}_j - k_T \psi_j - \frac{k_T \omega_T}{a_T} \psi_T + \dots \\
&\quad - \frac{k_T}{a_T} \left(-a_T \omega_T \int_0^t e_j^* dt + k_T \omega_T \int_0^t \psi_T dt \right) \\
\dot{\tau}^* &= k_T \bar{y}_j - k_T \bar{y}_j - k_T \psi_j - \frac{k_T \omega_T}{a_T} \psi_T + k_T \omega_T \int_0^t (\psi_j - \tau^*) dt - \frac{k_T^2 \omega_T}{a_T} \int_0^t \psi_T dt \\
\dot{\tau}^* &= -k_T \psi_j + k_T \omega_T \int_0^t \psi_j dt - \frac{k_T \omega_T}{a_T} \psi_T - \frac{k_T^2 \omega_T}{a_T} \int_0^t \psi_T dt - k_T \omega_T \int_0^t \tau^* dt
\end{aligned}$$

Definiendo dos componentes de control PI como:

$$\begin{aligned}
PI_j^d(\psi_j) &= k_T \left[\psi_j - \omega_T \int_0^t \psi_j dt \right] \\
PI_T^d(\psi_T) &= \frac{k_T \omega_T}{a_T} \left[\psi_T + k_T \int_0^t \psi_T dt \right]
\end{aligned}$$

y un componente integral como

$$I_j^d(\tau^*) = k_T \omega_T \int_0^t \tau^* dt$$

la derivada del set point se puede escribir como

$$\dot{\tau}^* = -PI_j^d(\psi_j) - PI_T^d(\psi_T) - I_j^d(\tau^*)$$

Finalmente el control secundario se puede escribir como

$$v_{qj} = PI_j(\psi_j - \tau^*) + PI_T^b(\psi_T) - \frac{\dot{\tau}^*}{a_j}$$

Resumiendo, los elementos de control son:

$$\begin{aligned}
PI_a(\psi_a) &= \kappa_a \left(\psi_a + t_a^{-1} \int_0^t \psi_a dt \right) & (G.11) \\
PI_T^b(\psi_T) &= \frac{a_T}{a_j} \left(\psi_T + \omega_j \int_0^t \psi_T dt \right) \\
PI_T^d(\psi_T) &= \frac{k_T \omega_T}{a_T} \left(\psi_T + k_T \int_0^t \psi_T dt \right) \\
PI_j^d(\psi_j) &= k_T \left(\psi_j - \omega_T \int_0^t \psi_j dt \right) \\
I_j^b(\psi_j - \tau^*) &= \omega_T \int_0^t (\psi_j - \tau^*) dt \\
I_T^h(\psi_T) &= \int_0^t \psi_T dt \\
I_j^d(\tau^*) &= k_T \omega_j \int_0^t \tau^* dt
\end{aligned}$$

utilizando los elementos y constantes definidas el *control QLD FF-OF* se puede reescribir de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
&\bullet \text{ Control de volumen} & (G.12) \\
v_q &= PI_V(\psi_V)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\bullet \text{ Control de temperatura} & (G.13) \\
\tau^* &= PI_T(\psi_T) + I_j^b(\psi_j - \tau^*) \\
\dot{\tau}^* &= I_j^d(\psi_j - \tau^*) - PI_T^d(\psi_T) - PI_j^d(\psi_j) \\
\dot{\tilde{\chi}}_j &= \omega_j \left[a_T I_T^h(\psi_T) - \frac{k_j}{\omega_T} I_j^b(\psi_j - \tau^*) - \tau^* \right] \\
v_{q_j} &= PI_j(\psi_j - \tau^*) + PI_T^b(\psi_T) + \frac{\dot{\tau}^*}{a_j} \\
\dot{\tilde{\chi}}_T &= -\omega_T \left[k_j I_T^h(\psi_T) - a_T I_j^b(\psi_j - \tau^*) \right]
\end{aligned}$$

• Control de concentración

(G.14)

$$v_{qe} = PI_c(\hat{\psi}_c)$$

$$\hat{\psi}_c = h(\tilde{\chi}_j, \tilde{\chi}_T, \psi_h, v_h, \tilde{w})$$

Apéndice H

Deducción del control propuesto en la forma I en lazo de control de concentración para el caso no monótono

Se parte de las ecuaciones del control de concentración

$$\bullet \text{ Control de concentración} \tag{H.1}$$

$$\dot{\hat{c}} = \beta(\hat{c}, y, u_h, \chi_h, d_a) \tag{H.2}$$

$$q_e = \gamma(\hat{c}, y, q_j, \chi_h, d_a)$$

El estimador de concentración puede escribirse como

$$\dot{\hat{c}} = \beta(\hat{c}, y, u_h, \chi_h, d_a)$$

$$\dot{c} = \beta(c + \bar{c}, \psi, v_h, \chi_h, \tilde{w})$$

integrando de ambos lados de la ecuación

$$c = \int_0^t \beta(c + \bar{c}, \psi, v_h, \chi_h, \tilde{w}) dt$$

definiendo un elemento de control integral I_c como:

$$I_c(c + \bar{c}, \psi, v_h, \chi_h, \tilde{w}) = \int_0^t \beta(c + \bar{c}, \psi, v_h, \chi_h, \tilde{w}) dt$$

se puede escribir

$$c = I_c(c + \bar{c}, \psi, v_h, \chi_h, \tilde{w})$$

por otro lado

$$v_{q_e} = q_e - \bar{q}_e$$

el valor nominal \bar{q}_e es el que se logra cuando la dinámica de concentración llega a su estado permanente

$$\dot{c} = -r + \frac{q_e}{y_V} (c_e - c)$$

$$0 = \dot{c} = -\bar{r} + \frac{\bar{q}_e}{\bar{y}_V} (\bar{c}_e - \bar{c})$$

$$\bar{r} = \frac{b_T + \frac{\bar{q}_e}{\bar{y}_V} (\bar{y}_T - y_{T_e}) + \frac{b_j + [\varpi_j(\bar{y}_j - y_{j_e}) - a_j] \bar{q}_j}{\varpi \bar{y}_V} + a_T \bar{y}_j}{\Delta}$$

$$\frac{\bar{q}_e}{\bar{y}_V} (\bar{c}_e - \bar{c}) = \bar{r}$$

$$\frac{\bar{q}_e}{\bar{y}_V} (\bar{c}_e - \bar{c}) = \frac{b_T + \frac{\bar{q}_e}{\bar{y}_V} (\bar{y}_T - \bar{y}_{T_e}) + \frac{b_j + [\varpi_j(\bar{y}_j - y_{j_e}) - a_j] \bar{q}_j}{\varpi \bar{y}_V} + a_T \bar{y}_j}{\Delta}$$

$$\frac{\bar{q}_e}{\bar{y}_V} (\bar{c}_e - \bar{c}) - \frac{\bar{q}_e}{\bar{y}_V} \frac{\bar{y}_T - \bar{y}_{T_e}}{\Delta} = \frac{b_T + \frac{b_j + [\varpi_j(\bar{y}_j - y_{j_e}) - a_j] \bar{q}_j}{\varpi \bar{y}_V} + a_T \bar{y}_j}{\Delta}$$

$$\bar{q}_e \frac{(\bar{c}_e - \bar{c}) - \left(\frac{\bar{y}_T - \bar{y}_{T_e}}{\Delta} \right)}{\bar{y}_V} = \frac{b_T + \frac{b_j + [\varpi_j(\bar{y}_j - y_{j_e}) - a_j] \bar{q}_j}{\varpi \bar{y}_V} + a_T \bar{y}_j}{\Delta}$$

$$\bar{q}_e = \left[\frac{\bar{y}_V}{(\bar{c}_e - \bar{c}) - \left(\frac{\bar{y}_T - \bar{y}_{T_e}}{\Delta} \right)} \right] \left[\frac{\bar{b}_T + a_T \bar{y}_j + \frac{\bar{b}_j + [\varpi_j(\bar{y}_j - y_{j_e}) - a_j] \bar{q}_j}{\varpi \bar{y}_V}}{\Delta} \right]$$

$$\bar{q}_e = \lambda(\bar{c}, \bar{y}, \bar{q}_j, \bar{b}_h, \bar{d}_a)$$

finalmente

$$\begin{aligned}v_{q_e} &= q_e - \bar{q}_e \\q_e &= \gamma(c + \bar{c}, \psi, v_j, \chi_h, \tilde{w}) \\v_{q_e} &= \gamma(c + \bar{c}, \psi, v_j, \chi_h, \tilde{w}) - \bar{q}_e\end{aligned}$$

Por lo tanto el control puede escribirse como

$$\begin{aligned}c &= I_c(c + \bar{c}, \psi, v_h, \chi_h, \tilde{w}) \\v_{q_e} &= \gamma(c + \bar{c}, \psi, v_j, \chi_h, \tilde{w}) - \bar{q}_e\end{aligned}$$