



Estimación de Estado e Incertidumbre en un CSTR Mediante Observador Asintótico y Modos Deslizantes de Alto Orden

Héctor Botero Castro^a, Juan Diego Sánchez –Torres^b, Esteban Jiménez Rodríguez^c, Oscar Jaramillo Zuluaga^d.

^{a, c, d} Universidad Nacional de Colombia – Sede Medellín, Facultad de Minas, Colombia, Grupo de Investigación en Procesos Dinámicos - Kalman

^b CINVESTAV, Guadalajara – México

*E-mail: habotero@unal.edu.co, jdsanch1@gmail.com, esjimenezro@unal.edu.co, odjaramilloz@unal.edu.co.

Resumen

En este artículo se propone una estructura de estimación de estado para un Reactor de Tanque Agitado en Continuo (CSTR), mediante un Observador Asintótico, conjuntamente con un estimador de perturbaciones basado en un algoritmo de modos deslizantes de alto orden, tipo Super Twisting Generalizado. El esquema de estimación propuesto permite la reconstrucción asintótica de la concentración en el reactor, con base en la medición de la temperatura al interior del mismo y de la chaqueta, en la presencia de cambios en el coeficiente global de intercambio de calor UA , la constante de frecuencia k_0 de la ecuación de Arrhenius y la energía de activación E .

Adicionalmente, la estructura es capaz de estimar UA y el término $k_0 e^{-\frac{E}{RT}}$ de la cinética. Las propiedades del esquema propuesto se demuestran matemáticamente y a través de simulaciones.

Palabras clave: Estimador de Estado, Observador de Estado, Modos Deslizantes, Observador no Lineal.

1. Introducción

La estimación del estado en procesos químicos es una labor necesaria para lograr implementar estrategias de control, detección de fallas y monitoreo de forma confiable y a un costo razonable. Dichas estrategias de estimación permiten reducir el número de sensores instalados en una planta, ya que sólo se requiere la medición de algunas variables y un modelo dinámico del proceso. Sin embargo, la mayoría de los modelos suponen algunos parámetros fijos, mientras en el sistema real estos parámetros cambian de forma permanente. Lo anterior hace que las variables de estado estimadas se desvíen de los valores reales y que se produzcan errores en el sistema de control.

Por ejemplo, en un proceso químico se presentan cambios dinámicos como resultado de la operación normal, originados por el envejecimiento de los materiales, la obstrucción de conductos, el cambio en las propiedades físicas de los componentes y el cambio en las propiedades de los reactivos que ingresan. Estos cambios hacen que algunos de los parámetros del proceso se modifiquen, especialmente los relacionados con las cinéticas de reacción y con la transferencia de calor. Como resultado, el modelo del proceso utilizado por un observador de estados puede desactualizarse y generar mediciones desviadas de su valor real. Este problema hace que la

estimación de estado de sistemas no lineales en la presencia de incertidumbre paramétrica sea una línea de investigación abierta (Soroush, 1998; Farza et al, 2009).

Para resolver este problema, se han propuesto observadores adaptables de estados y parámetros para sistemas no linealmente parametrizados, aplicados a una clase de sistemas MIMO, no lineales, uniformemente observables (Farza et al, 2009). En este último trabajo se aplicó el observador en la estimación de estados y cinéticas químicas de un biorreactor. Otro enfoque para la estimación de estados en reactores químicos es el observador asintótico (AO), el cual permite la estimación de concentraciones en un CSTR independiente del conocimiento de las cinéticas, además de tener un diseño muy simple y que no requiere cumplir plenamente la condición de observabilidad (Dochain, Perirer and Ydstie, 1992). Sin embargo, este observador no considera el cambio paramétrico en el coeficiente global de transferencia de calor, el cual puede modificarse mucho en la operación normal del proceso. Además, el observador asintótico no permite estimar parámetros cinéticos en línea, lo cual puede ser útil a la hora de conocer la trazabilidad del proceso.

En este sentido, aquí se propone una estructura de estimación de estado para un CSTR, mediante un Observador Asintótico, conjuntamente con un estimador de perturbaciones basado en un algoritmo de modos deslizantes de alto orden, tipo Super Twisting Generalizado. El esquema de estimación propuesto permite la reconstrucción asintótica de la concentración y es capaz de estimar UA y el término $k_0 e^{-\frac{E}{RT}}$ de la cinética.

2. Modelo del Proceso

En este trabajo se utiliza un modelo de CSTR, el cual es típico en la industria de procesos y cuya complejidad ha sido evidenciada (Bequette, 2002). En este caso se supone que el modelo tiene tres variables de estado: concentración (C_A), temperatura en el tanque (T) y temperatura del líquido refrigerante que circula por la chaqueta (T_j). Se supone que el nivel (L) está perfectamente controlado. Con todo esto, el modelo es todavía representativo de muchas situaciones comunes en procesos y bioprocesos (Bequette, 2002; Dochain, 2003). Dentro del reactor se produce una reacción química exotérmica de la forma $A \rightarrow B$. Las ecuaciones del modelo, obtenidas desde balances de masa y energía tanto en la masa reactiva como en el fluido que viaja por la chaqueta, son:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F}{V}(C_{in} - C_A) - k_0 C_A e^{-\frac{E}{RT}} \quad (1)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V}(T_{in} - T) - \frac{\Delta H}{\rho C_p} k_0 C_A e^{-\frac{E}{RT}} + \frac{UA}{\rho C_p V}(T_j - T) \quad (2)$$

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{F_{jf}}{V_j}(T_{jf} - T_j) - \frac{UA}{\rho_j C_{pj} V_j}(T_j - T) \quad (3)$$

Los parámetros nominales del CSTR y sus unidades se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Parámetros del CSTR

Parámetro	Nombre	Valor	Unidad
F	Flujo de alimento hacia el reactor	0.1605	$m^3 \cdot min^{-1}$
V	Volumen de la masa reactiva	2.4069	m^3
C_{in}	Concentración del reactivo A en la entrada	2114.5	$gmol \cdot m^{-3}$

k_0	Constante de la ley de Arrhenius	2.8267×10^{11}	min^{-1}
E	Energía de activación	75361.14	J.gmol^{-1}
R	Constante universal de los gases	8.3174	$\text{J.gmol}^{-1}\text{K}^{-1}$
T_{in}	Temperatura de de entrada del reactivo A	295.22	K
ΔH	Calor de reacción	-9.0712×10^4	J.gmol^{-1}
ρ	Densidad de la mezcla en el reactor	1000	kg.m^{-3}
C_p	Capacidad calorífica de la alimentación y el producto	3571.3	J.kg^{-1}
U	Coefficiente global de transferencia de calor	2.5552×10^4	$\text{J.(s.m}^2.\text{K})^{-1}$
A	Área de intercambio de calor	8.1755	m^2
F_{ff}	Flujo de alimento hacia la chaqueta	0.3376	$\text{m}^3.\text{min}^{-1}$
V_j	Volumen de la chaqueta	0.24069	m^3
T_j	Temperatura en la chaqueta	279	K
T_{jf}	Temperatura en el alimento la chaqueta	279	K
ρ_j	Densidad del fluido de la chaqueta y C_p	1000	kg.m^{-3}
C_{pj}	Capacidad calorífica del fluido en la chaqueta	3728.87	J.kg^{-1}

Para un CSTR real, el valor de la concentración del reactivo (C_A) no es medible directamente debido a los altos costos requeridos por el sensor. Por lo tanto, es altamente recomendable disponer de un sensor virtual que produzca la estimación en línea de esta variable. Tal dispositivo se basa en un observador, el cual toma otras mediciones del proceso, como T and T_j , y estima el valor real de C_A con base en un modelo. Sin embargo, en el funcionamiento normal del CSTR se pueden presentar cambios paramétricos, los cuales hacen que un observador de estado basado en un modelo de parámetros fijos quede desactualizado y genere mediciones desviadas de su valor real. Con base en esto, en la siguiente sección se ilustra una forma de estimación de estado y parámetros para este caso de estudio.

3. Diseño del Observador Asintótico y los Estimadores de Parámetros

3.1. Diseño del observador asintótico

El diseño del AO para el CSTR requiere la siguiente transformación que elimina la dependencia de k_0 y E en las ecuaciones del modelo (Dochain, Perirer and Ydstie, 1992):

$$z = C_A - \frac{\rho C_p}{\Delta H} T \quad (4)$$

Remplazando en la dinámica del sistema representada por (1) y (2) se obtiene:

$$\dot{z} = \frac{F}{V} \left(C_{in} - z - \frac{\rho C_p}{\Delta H} T_{in} \right) - \frac{F}{V} z - \frac{UA}{\Delta H V} (T_j - T) \quad (5)$$

La ecuación (5) es el resultado de una transformación en invariantes de reacción que permite combinar las ecuaciones (1) y (2) del modelo para obtener una expresión independiente de los parámetros relacionados con las cinéticas de la reacción k_0, E . Sin embargo, la ecuación (5) tiene una dependencia del factor UA . Por lo tanto, aquí se propone utilizar más información del modelo,

específicamente la dinámica de la chaqueta (3), para obtener un observador asintótico que permita estimar la concentración, independiente de los cambios que se produzcan en k_0 , E y UA . El observador propuesto se obtiene al realizar las siguientes transformaciones y aplicarlas en las ecuaciones (1) a (3):

$$\hat{z}_1 = T + \frac{\rho_j C_{pj} V_j T_j}{\rho C_p V} \quad (6)$$

$$\hat{z}_2 = \hat{C}_{A_{asint}} - \frac{\rho C_p}{\Delta H} \hat{z}_1 \quad (7)$$

Con lo cual la dinámica del estado estimado transformado queda de la forma:

$$\dot{\hat{z}}_2 = \frac{F}{V} \left(C_{in} - \hat{z}_2 - \frac{\rho C_p}{\Delta H} \hat{z}_1 \right) - \frac{\rho C_p F}{\Delta H V} (T_{in} - T) - \frac{\rho_j C_{pj} F_{jf}}{\Delta H V} (T_{jf} - T_j) \quad (8)$$

la cual no contiene ninguno de los parámetros k_0, E, UA . Con base las ecuaciones (6) a (8) es posible calcular $\hat{C}_{A_{asint}}$ como la estimación de la concentración, desde las mediciones de T y T_j , independiente de la variación en los parámetros k_0, E, UA . La dinámica del error para este observador asintótico puede ser calculada como:

$$\dot{e}_{z2} = \dot{z}_2 - \dot{\hat{z}}_2 = -\frac{F}{V} e_{z2} \quad (9)$$

la cual es asintóticamente estable.

3.2. Diseño del estimador de parámetros

Para el modelo descrito por (1) a (3), se define el término de cinética de reacción $\phi = k_0 e^{-\frac{E}{RT}}$, el cual se supone desconocido y por lo tanto debe ser estimado. De esta forma la dinámica de ϕ dada por $\frac{d\phi}{dt}$, también es desconocida y se supone acotada, es decir $\frac{d\phi}{dt} = \Delta_\phi$, con $|\Delta_\phi| < \delta$, $0 < \delta < \infty$. Similarmente, el parámetro UA se supone como una constante desconocida y para ser estimada, con dinámica $\frac{d(UA)}{dt} = 0$. Entonces, para estimar estos dos parámetros se propone el siguiente estimador:

$$\frac{d\hat{T}}{dt} = \frac{F}{V} (T_{in} - T) - \frac{\Delta H}{\rho C_p} \hat{C}_{A_{asint}} \hat{\phi} + \frac{\bar{U}A}{\rho C_p V} (T_j - T) + k_{11} \varphi_1(\tilde{T}) \quad (10)$$

$$\frac{d\hat{T}_j}{dt} = \frac{F_{jf}}{V_j} (T_{jf} - T_j) - \frac{\bar{U}A}{\rho_j C_{pj} V_j} (T_j - T) + k_{12} \varphi_1(\tilde{T}_j) \quad (11)$$

$$\frac{d\hat{\phi}}{dt} = -k_{21} \varphi_2(\tilde{T}) \quad (12)$$

$$\frac{d(\hat{U}A)}{dt} = -k_{22} \varphi_2(\tilde{T}_j) \quad (13)$$

Donde: $\tilde{T} = T - \hat{T}$; $\tilde{T}_j = T_j - \hat{T}_j$; $\varphi_1(\cdot) = |\cdot|^{\frac{1}{2}} \text{sign}(\cdot) + \mu_1(\cdot)$; $\varphi_2(\cdot) = \text{sign}(\cdot) + \mu_2(\cdot)$; con $\text{sign}(\cdot)$ igual a la función signo y $\mu_1 = \mu_2 = 10$. El estimador de parámetros (10) a (13) tiene la forma de un estimador basado en observador (Oliveira et al, 2002; Perrier et al, 2000), pero aquí se aprovechan las propiedades de los modos deslizantes. La convergencia de la estructura completa se puede garantizar así: como $\hat{C}_{A_{asint}}$ es asintóticamente estable, lo cual se mostró en (9), y el

algoritmo super twisting también tiene esa propiedad (Moreno and Osorio, 2008), la cascada observador y estimador también es estable (Sundarapandian, 2004).

4. Resultados de Simulación

Para verificar el comportamiento de los observadores y los estimadores se introdujeron los cambios que se muestran en la Tabla 2; los resultados de la simulación se ilustran en las Figuras 1 a 3. Para el caso de la estimación de la concentración C_A se diseñó también un Filtro de Kalman Extendido (FKE) con el fin de comparar.

Tabla 2. Cambios introducidos en la simulación

Variable	Tiempo del cambio (min)	Magnitud del cambio
$\hat{x}(0)$	0	$0.9[C_A(0), T(0)]$
F	200	50 % ↓ , caída en escalón
k_0	400	20% ↑ , subida exponencial en 5 min
E	600	Pulso del 1% ↑ , caída exponencial en 5 min
UA	800	50% ↑ , subida exponencial en 5 min
T_{in}	1200	Pulso del 10% ↑ , caída exponencial en 0.5 min

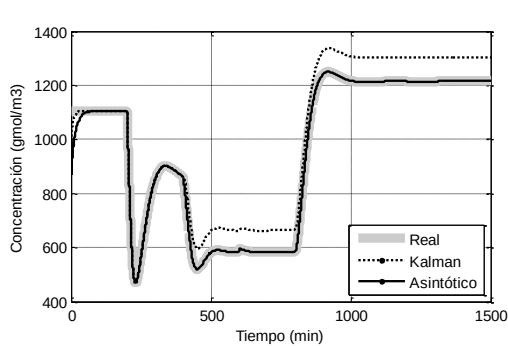


Figura 1. Estimación de la concentración

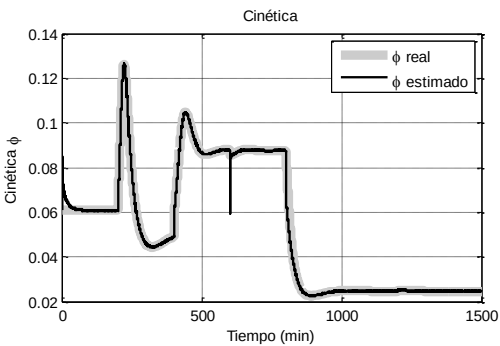


Figura 2. Estimación de la cinética de reacción

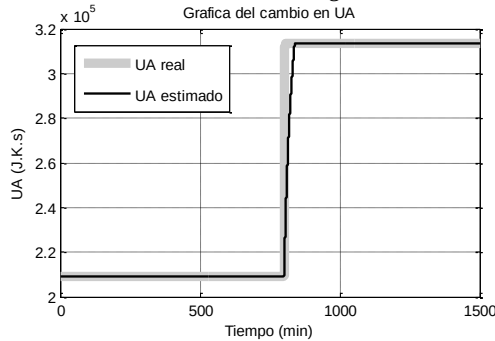


Figura 3. Estimación del coeficiente global de transferencia de calor

Como puede observarse de la Figura 1, el observador asintótico es capaz de estimar la concentración C_A , independiente de los cambios paramétricos introducidos, mientras que el FKE presenta error de estado estacionario desde el primer cambio paramétrico en $t=400$ min. Así mismo, se puede ver que los estimadores de parámetros (Figuras 2 y 3), tanto para la cinética de

reacción como para el coeficiente de intercambio de calor, convergen a los respectivos valores. Por lo tanto el esquema de estimación de estado y parámetros funciona correctamente.

5. Conclusiones

Se propuso una estructura de estimación de estado para reactores químicos con base en el observador asintótico y un estimador de parámetros basado en modos deslizantes, la cual fue probada con un modelo de CSTR no lineal. La estructura propuesta permite mejorar el comportamiento estacionario del observador asintótico para este caso, ya que lo hace insensible a ante variaciones en k_0 , E y UA . Adicionalmente, se logró la estimación de los parámetros mencionados con base en modos deslizantes de alto orden. La estructura propuesta tiene convergencia garantizada, la cual es el resultado de la convergencia inherente del observador asintótico y del algoritmo super twisting que utiliza el estimador de parámetros. Los resultados mostrados en este documento pueden ser fácilmente extendidos a otros procesos.

Referencias

BEQUETTE, W. (2002). Behavior of a CSTR with a Recirculating Jacket Heat Transfer System. *Proceedings of the American Control Conference*, Anchorage, AK.

DOCHAIN, D., PERRIER, M. AND YDSTIE, B. (1992). Asymptotic Observers for Stirred Tank Reactors. *Chemical Engineering Science*, Vol 47, (15/16), 4167-4177.

DOCHAIN, D. (2003). State and Parameter Estimation in Chemical and Biochemical Processes: a Tutorial. *Journal of Process Control*, 2003, Vol 13, 801-818.

FARZA, M.; M'SAAD, M; MAATOUG, T. AND KAMOUN, M. (2009) Adaptive Observers for Nonlinearly Parameterized Class of Nonlinear Systems, *Automatica*, Vol 45, 2292-2299.

MORENO, J. AND OSORIO, M. (2008). Lyapunov Approach to Second-Order Sliding Mode Controllers and Observers. *Proceedings of the 47th IEEE Conference on Decision and Control* Cancun, Mexico, Dec. 9-11.

OLIVEIRA, R., FERREIRA, E. AND FEYO DE AZEVEDO, S. (2002). Stability, Dynamics of Convergence and Tuning of Observer – Based Kinetics Estimators. *Journal of Process Control*, Vol 12, 311-323.

PERRIER, M., FEYO DE AZEVEDO, S., FERREIRA, E. AND. DOCHAIN, D. (2000). Tuning of Observer – Based Estimators: Theory and Application to the On - Line Estimation of Kinetic Parameters. *Control Engineering Practice*, Vol 8, 377-388.

SOROUGH, M. (1998). State and Parameter Estimations and Their Applications in Process Control. *Computers & Chemical Engineering*, Vol 23, 229-245.

SUNDARAPANDIAN, V. (2004). Global Asymptotic Stability of Nonlinear Cascade Interconnected Systems. *Mathematical and Computer Modeling*, Vol 40, 227–232.