



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO

PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA

INSTITUTO DE INGENIERÍA

Estimación de tasas de reacción en bioprocesos
mediante observadores tipo super-twisting

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN INGENIERÍA

INGENIERIA ELÉCTRICA - CAMPO CONTROL

P R E S E N T A

Ismael Mendoza Hernández

DIRIGIDA POR:

Jaime Alberto Moreno Pérez



**INSTITUTO
DE INGENIERÍA
UNAM**

Ciudad Universitaria

FECHA

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dra. Ma. Cristina Verde Rodarte

Secretario: Dr. Alejandro Vargas Casillas

Vocal: Dr. Jaime A. Moreno Pérez

1er. Suplente: Dr. Edmundo G. Rocha Cózatl

2do. Suplente: Dr. Leonid Fridman

Lugar donde se realizó la tesis:

Instituto de Ingeniería, UNAM

Coordinación de Eléctrica y Computación

TUTOR DE TESIS:

Dr. Jaime Alberto Moreno Pérez

FIRMA

AGRADECIMIENTOS

Agradezco profundamente al Dr. Jaime A. Moreno Pérez por haber dirigido este trabajo y llevarlo a buen fin, y al Dr. Leonid Fridman por haber sido mi co-tutor.

A mis profesores de la maestría por ser un ejemplo de dedicación, constancia y compromiso.

A mis compañeros del grupo de investigación de modos deslizantes y compañeros de la maestría, quienes me acompañaron estos dos años. En especial quiero agradecer al M. en Ing. Eder Guzmán Baltazar por haber contribuido de forma significativa en el desarrollo de este trabajo.

Agradezco el apoyo económico brindado por el CONACyT durante el tiempo que realicé mis estudios de maestría

Los espíritus finos que son sólo finos no alcanzan a comprender los principios de la geometría, y los espíritus geométricos que son sólo geométricos se pierden en asuntos sutiles, que apenas se perciben y que hay que sentir. Es raro que un espíritu fino sea geométrico, y que un espíritu geométrico sea fino y perciba las sutilezas. Pero el espíritu de finura y el de geometría coinciden por lo menos en ser distintos del espíritu falso, que no es ni fino ni geométrico. El espíritu de finura y el de geometría son espíritus rectos, pero de diferentes órdenes de rectitud.

Pascal, Pensamientos.

Resumen

En este documento se presenta una nueva clase de observadores basados en el Algoritmo Genérico de Segundo Orden (AGSO) aplicados a bioprocesos, con el fin de estimar las tasas de reacción en línea tomando en cuenta un conocimiento mínimo de éstas.

También se muestra que dadas las condiciones de existencia de un observador asintótico, es posible reconstruir cada una de las tasas de reacción presentes en el modelo y además estimar todos los estados no conocidos. Para realizar esto último, se incluyen a las tasas de reacción estimadas en las dinámicas de los estados desconocidos.

Mediante simulaciones de diferentes casos de estudio, se muestra que es posible reconstruir las tasas de reacción de forma satisfactoria, inclusive bajo la presencia de ruido en las mediciones. En algunos de estos casos los resultados se comparan con observadores de alta ganancia, dejando ver que esta nueva clase de observadores ofrece un mejor compromiso entre velocidad de convergencia y rechazo a ruido.

Para el caso de estimación de estados no conocidos, y teniendo como referencia al observador asintótico, se muestra que los resultados ofrecen un mejor rechazo a ruido.

Contenido

Resumen	IX
Contenido	X
Lista de Figuras	XIII
Lista de Tablas	XV
1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Objetivo	2
1.3. Estado del arte	3
1.4. Descripción de capítulos	4
2. Generalidades de bioprocesos	7
2.1. Introducción a bioprocesos	7
2.2. Sensores en bioprocesos	8
2.3. Modelo general de bioprocesos	10
3. Observadores y estimadores basados en AGSO	17
3.1. Modos deslizantes de orden superior	17
3.2. Observador Super-Twisting Generalizado (OSTG)	20
3.3. Observador OSTG para estimar perturbación	25
3.4. Estimador Super-Twisting Variante (ESTV)	26
4. Observadores OSTG para estimar tasas de reacción en bioprocesos	31
4.1. Ejemplo de motivación: Crecimiento microbiano	32
4.1.1. Diseño de Observadores OSTG y ESTV para estimar tasa de reacción específica	34
4.1.2. Comparación: ESTV vs OAG	37
4.1.3. Estimación de estado no medido: substrato	39
4.2. Estimación de tasas de reacción para el modelo general de bioprocesos	41
4.2.1. Estimar todas las tasas de reacción con OSTG	41
4.2.2. Estimación de estados no medidos	45
4.2.3. Estimar tasas de reacción específicas con ESTV	47

5. Casos de estudio	51
5.1. Ejemplo 1: Proceso de digestión anaerobia (PDA)	52
5.1.1. Obtención de todas las tasas de reacción en PDA con OSTG	53
5.1.2. Estimación de los estados no medidos	53
5.1.3. Simulación y resultados del ejemplo de PDA	54
5.2. Ejemplo 2: Producción de lipasa (PL)	56
5.2.1. Modelo de producción de lipasa	57
5.2.2. Aplicación de OSTG para estimar tasas de reacción en PL	60
5.2.3. Conclusiones del ejemplo de producción de lipasa: Observador OSTG, OAG y STA-clásico	66
5.3. Ejemplo 3: Crecimiento de fitoplancton marino	66
5.3.1. Modelo de fitoplancton marino	67
5.3.2. Escenario 1: Estimación de tasa de fotosíntesis	68
5.3.3. Escenario 2: ESTV para la estimación de N	71
5.3.4. Escenario 3: Estimación de estado N	72
5.3.5. Escenario 4: Observador Asintótico para estimar N	72
5.3.6. Resultados de estimación de N bajo los diferentes escenarios	73
5.3.7. Resultados para la estimación de intensidad luminosa	75
6. Resultados y conclusiones	77
6.1. Resultados y trabajo realizado	77
6.2. Aportes	78
6.3. Conclusiones	79
6.4. Trabajo futuro	80
A. Algoritmo Super-Twisting Variante	81
B. Artículo presentado en el Congreso Mundial del IFAC, 2011	85
C. Artículo presentado en el Congreso Anual del AMCA, 2011	93
Referencias	101

Lista de Figuras

1.1. Objetivo de tesis	3
3.1. Términos no lineales ϕ_1, ϕ_2 en función del error	21
3.2. Condición de signo definido para $\gamma(t)$	27
4.1. Ejemplo de motivación: Tasa de dilución y señal de biomasa con ruido . . .	34
4.2. Ejemplo de motivación: Estimación tasa de crecimiento específica con observadores OSTG y ESTV	37
4.3. Ejemplo de motivación: ESTV y OAG para estimar tasa de crecimiento . .	38
4.4. Ejemplo de motivación: Estimación de substrato, comparación con un OA .	40
5.1. Ejemplo PDA, Ruido en las mediciones de biomasa X_1 y substrato S_1 . . .	54
5.2. Ejemplo PDA, estimación de tasas de reacción	55
5.3. Ejemplo PDA, estimación de estados no medidos	56
5.4. Condiciones de simulación modelo PL	59
5.5. Ejemplo PL: estimación de tasas de reacción $\varphi_{1,2}$ con OSTG y OAG	62
5.6. Ejemplo PL: estimación de tasa de reacción φ_3 con OSTG y OAG	63
5.7. Ejemplo PL: estimación de tasa de reacción φ_3 con STA y OSTG	64
5.8. Ejemplo PL: estimación de tasas de reacción $\varphi_{1,2}$ con STA y OSTG	65
5.9. Ejemplo Fitoplancton marino, señales medidas con ruido	68
5.10. Ejemplo Fitoplancton marino, estimación de tasa de fotosíntesis	70
5.11. Ejemplo Fitoplancton marino, estimación de consorcio celular de nitrógeno	74
5.12. Ejemplo Fitoplancton marino, estimación de intensidad luminosa	76

Lista de Tablas

3.1. Casos particulares AGSO	22
3.2. Tipos de convergencia del AGSO	24
4.1. Ejemplo de motivación: condiciones iniciales y valores de parámetros en el modelo	33
4.2. Ejemplo de motivación: parámetros y ganancias observadores Ω_1 y Ω_2	36
5.1. Condiciones iniciales y valores de parámetros en simulación PDA	54
5.2. Condiciones iniciales valores de parámetros en modelo de PL	59
5.3. Valores de parámetros en el algoritmo AGSO, observadores OSTG, OAG y STA-clásico	61
5.4. Ejemplo Fitoplancton marino: Condiciones iniciales y valores de parámetros en el modelo	68
5.5. Valores de calibración observadores	69

Capítulo 1

Introducción

En las diversas áreas de aplicación que encuentra la teoría de control hay un campo particular que trata sobre la manipulación de organismos vivos, los llamados sistemas biológicos. En este trabajo, se tratará sobre sistemas biológicos aún más particulares referidos normalmente como bioprocesos, los cuales generalmente tienen lugar en un biorreactor.

Los bioprocesos con propósitos tecnológicos han evolucionado de forma significativa durante las últimas décadas, con requerimientos cada vez más exigentes relacionados a su industrialización y a la creación de nuevos productos. Los retos de tipo normativo, de calidad de productos, de optimización, etc., representan problemas vigentes que pueden ser tratados mediante técnicas de control. Uno de estos problemas, y que es un punto central en el área, es la falta de instrumentación para implementar técnicas de control en tiempo real que mejoren las condiciones en las que se llevan a cabo los procesos en general. Para enfrentar este problema, desde la teoría de control, se propone el uso de observadores y estimadores; los cuales permiten obtener información relevante acerca del sistema.

1.1. Motivación

Debido a la complejidad de los sistemas biológicos y a la falta de instrumentación, los modelos dinámicos útiles para el desarrollo de observadores contienen términos que no son bien conocidos (incertidumbre). No importando el área (farmacéutica, de tratamiento de desechos, cosmética, de alimentos, etc.) el conocimiento que se tiene acerca de las tasas

de reacción, las cuales cuantifican la actividad biológica en el proceso, es pobre debido a la falta de relaciones y/o leyes bien establecidas.

Es por eso que en el ámbito de bioprocesos hay interés en esquemas de observación en los cuales la estimación (de estados y/o parámetros) se hace sin un conocimiento detallado del modelo. Esto es, se buscan esquemas de observación que incluyan sólo las partes bien conocidas (parte hidráulica en un reactor), evitando las partes mal conocidas (generalmente las cinéticas de reacción) en el diseño del observador. Pero más allá de estimar las concentraciones de componentes bioquímicos del proceso, hay un interés inherente en técnicas que permitan obtener un estimado de las tasas de reacción.

Obtener un estimado de las tasas de reacción deja posibilidades abiertas para poder aplicar nuevas técnicas de control, optimizar el diseño y el proceso en cuestión, e ir ganando en la comprensión de este tipo de sistemas.

Por otra parte, recientemente se ha reportado una nueva clase de observadores basados en modos deslizantes que amplían la clase de perturbaciones que se pueden tratar mediante la adición de términos de alto orden. Características únicas como insensibilidad ante perturbaciones, convergencia exacta y en tiempo finito y uniformidad con respecto a condiciones iniciales; hacen de ellos una herramienta muy atractiva para tratar con modelos con incertidumbres. Además de que, dadas las condiciones es posible reconstruir inclusive a la perturbación.

1.2. Objetivo

En el presente trabajo tiene como objetivo principal estimar las tasas de reacción en bioprocesos mediante el uso de observadores y/o estimadores basados en el Algoritmo Genérico de Segundo Orden (AGSO) reportado en [Moreno11]; el cual conjunta las propiedades de algoritmos basados en modos deslizantes de segundo orden y algoritmos con términos de alto orden.

Siguiendo la Figura (1.1), el objetivo de esta tesis se puede explicar como: dado un bioproceso en el cual se conocen las entradas y algunas de sus salidas, construir un observador para estimar las tasas de reacción. Para hacer esto es necesario asumir que

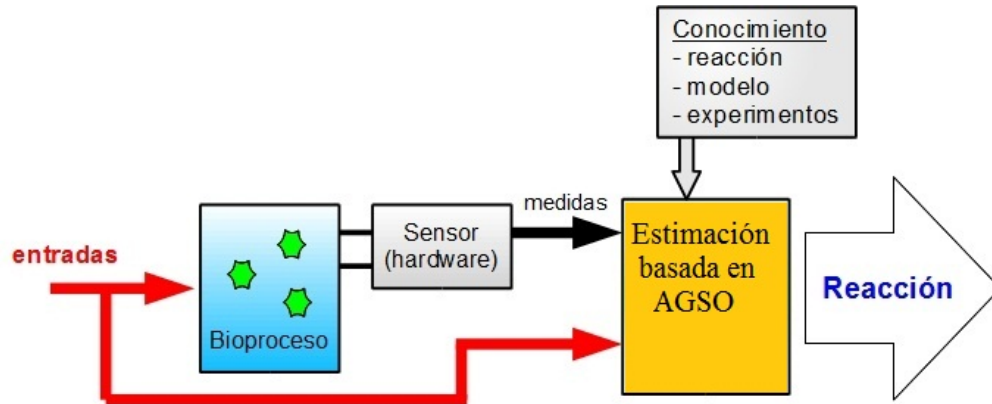


Figura 1.1: Objetivo de tesis

la incertidumbre en la dinámica de los estados está concentrada en las tasas de reacción. En el diseño del observador (basados en el AGSO) se plantea tratarlas como cantidades desconocidas (perturbaciones) y a su vez reconstruirlas sin necesidad de tener un modelo detallado de la función analítica y/o de sus parámetros. En el caso en el que se tenga un conocimiento mínimo de las tasas de reacción, éste se puede incorporar al diseño del observador dando lugar a diferentes variantes, una de las cuales permite aplicar una nueva clase de estimador de parámetros en tiempo finito y el cual es una contribución original de este trabajo.

Como utilidad inmediata del hecho de obtener un estimado de la tasa de reacción, o de algunos de los parámetros que incluye, se explora la posibilidad de utilizarlos para a su vez estimar los estados no medidos del sistema, siempre y cuando sea posible.

1.3. Estado del arte

En este trabajo son de interés solo aquellas técnicas de observación que evitan un conocimiento detallado de las tasas reacción, tal que los resultados que aquí se proponen sean comparables. Dentro de los esquemas de observación que evitan el modelado de la tasa de reacción los hay con dos propósitos:

- Observadores que estiman los estados no medibles del proceso (concentraciones).

- Estimadores para obtener tasas de reacción específicas (ó parámetros asociados a éstas).

Para la primera clase, donde el propósito es obtener un estimado de los estados no conocidos del proceso; la aproximación más conocida es el llamado “Observador Asintótico” (OA), reportado en [Bastin90]. El OA permite la estimación de los estados realizando un combinación lineal de los estados medibles y no medibles del sistema, sin conocimiento alguno de las tasas de reacción; pero esto tiene un costo: no se tiene ningún grado de libertad en el diseño del observador por lo que su convergencia está dada por las condiciones experimentales en las que se desarrolla el proceso.

En la segunda clase, los esquemas que permiten obtener un estimado de las tasas de reacción, la aproximación más referenciada en la literatura es la aplicación de Observadores de Alta Ganancia (OAG), originalmente reportada en [Farza98, Farza00]. En la que observadores de alta ganancia son aplicados para reconstruir las tasas de reacción, o bien estimar parámetros contenidos en ellas.

Ambos observadores, OA y OAG, son reportados de forma detallada en los siguientes capítulos. El hecho de incluir sólo a estos dos tipos de observadores como referencia es porque en cierto sentido son las dos aproximaciones, que evitando el modelado de las tasas de reacción, más éxito han tenido en el ámbito de bioprocesos.

1.4. Descripción de capítulos

En el capítulo 2 se da una visión somera de bioprocesos y se presenta su modelo general, el cual será útil para la generalización de los observadores aquí propuestos. En el capítulo 3 se dan las principales características de observadores basados en modos deslizantes; después se reporta el Algoritmo Genérico de Segundo Orden (AGSO) en el que están basados el tipo de observadores utilizados en este trabajo. Además se reporta, como aporte original de este trabajo de tesis, el Estimador Super-Twisting Variante (ESTV), que es un estimador de parámetros variantes en el tiempo que converge en tiempo finito y de forma exacta.

El capítulo 4 inicia con un ejemplo de motivación en el que se muestra la idea

principal para reconstruir las tasas de reacción mediante el Observador Super-Twisting Generalizado (OSTG); posteriormente se realiza la generalización de observadores tipo OSTG aplicada a bioprocesos utilizando el modelo general y se muestra el caso en el que es posible reconstruir todas y cada una de las tasas de reacción y estados no medidos.

En el capítulo 5 se reportan varios casos de estudio tomados de la literatura, en los que se compara con otros observadores y estimadores bajo condiciones ideales y en presencia de ruido en las mediciones, además de una discusión parcial de los resultados de simulación.

Finalmente, en el capítulo 6 se dan las conclusiones, un compendio del trabajo realizado y del trabajo futuro.

Capítulo 2

Generalidades de bioprocesos

2.1. Introducción a bioprocesos

El campo de aplicación de los bioprocesos incluye la industria farmacéutica, de alimentos, cosméticos, la degradación de compuestos peligrosos, el tratamiento de aguas residuales y recientemente la obtención de biocombustibles. En este tipo de procesos (procesos biotecnológicos) el agente de cambio son organismos celulares de origen animal y/o vegetal, que mediante su actividad metabólica generan diversos productos de tipo químico y/o biológico, y que generalmente tienen lugar en un biorreactor [Doran95].

El refinamiento de técnicas de control ha contribuido al mejoramiento de la calidad de los productos y su innovación, así como también a la optimización de los recursos utilizados para obtenerlos y por ende mejoras en el diseño y operación del proceso en general. Sin embargo, el estudio de este tipo de sistemas presentan una alta complejidad debido a la variedad y multiplicidad de las interacciones que se establecen entre sus elementos.

Un aspecto en el que se ve reflejada está complejidad es la dificultad de establecer un modelo para un bioproceso dado. Los modelos que son simplificados, o bien desarrollados desde un enfoque mecanicista, y que pueden ser utilizados para propósitos de control son tales que producen resultados con baja reproducibilidad y que representan un problema al momento de escalar el proceso. Hasta ahora los modelos existentes contienen términos que no son bien conocidos, este desconocimiento se concentra principalmente en los términos

que describen y cuantifican la actividad de los microorganismos en el medio del reactor en el que se encuentran, es decir, las tasas de reacción.

Otra característica que suma dificultad a su estudio es la falta de instrumentación, la cual resulta en elementos de alto precio con poca confiabilidad y lo cual se discute a detalle en la siguiente sección.

2.2. Sensores en bioprocesos

Los sensores son una parte muy importante en cualquier esquema de control, puesto que mediante la información que proporcionan se pueden conocer y modificar las condiciones del sistema que se encuentra bajo estudio, las interacciones entre sus elementos, diagnosticar mal funcionamiento, determinar elementos que necesitan mantenimiento, etc.

La falta de instrumentación en bioprocesos hace que este tipo de sistemas sean difíciles de estimar y de controlar. Por ser este un trabajo dedicado a la aplicación de una clase observadores a bioprocesos para estimar las tasas de reacción, es importante establecer un panorama del uso de sensores en el área y sus principales inconvenientes.

En bioprocesos se hace uso de una gran variedad de instrumentos analíticos (HPLC, cromatografía de gases, espectrometría de masas, análisis de carbono orgánico, etc), y de sensores que ofrecen resultados o mediciones periódicas fuera de línea, tales que su uso queda restringido para realizar esquemas de control en tiempo real, además del alto costo que representan.

Por otra parte, el uso de sensores que ofrecen mediciones en línea (flujo, pH, temperatura, presión, oxígeno disuelto, potencial de óxido reducción, etc.) ha tenido un gran avance en las últimas décadas. Los requerimientos que deben cumplir dichos sensores pueden variar dependiendo del campo de aplicación, pero dentro de los principales se pueden mencionar: la capacidad de operar en medios agresivos y/o estériles, mantener su calibración durante largos periodos de tiempo (semanas) y que además su tiempo de respuesta sea relativamente rápido.

Son este tipo de sensores con los que generalmente se cuenta al momento de diseñar un lazo de control. Es por ello que, por ejemplo, en la mayor parte de los procesos aerobios

se utiliza la medición de oxígeno disuelto como la medición principal para establecer un lazo de control [Alford06] por tres razones: los datos que se obtienen son confiables y pueden utilizarse en línea, además de que el sensor es relativamente barato.

Dentro de los sensores que son utilizados en el área, existe un gran interés en aquellos que miden la concentración de microorganismos dentro de un reactor y que ofrezcan mediciones línea. En las últimas décadas se ha puesto especial atención en el desarrollo de sensores que puedan medir la cantidad total de biomasa dentro de un reactor, considerándola como una entidad funcional que puede ser caracterizada por medidas macroscópicas [Harmand08]. La obtención de datos de las condiciones morfológicas, fisiológicas, y de densidad poblacional de los microorganismos que se encuentran en un reactor es de primera importancia, puesto que el proceso entero está ligado a la actividad de éstos.

Los sensores de biomasa, por su principio de operación, se clasifican básicamente en cuatro categorías [Kiviharju08]: espectroscopía dieléctrica, pruebas ópticas, espectroscopía infrarroja y fluorescencia. Cada tipo de sensor ofrece diferentes ventajas; sin embargo hoy día, no importando el tipo de sensor, aún se tienen problemas serios en estimar la cantidad de microorganismos dentro de un reactor cuando la biomasa es muy baja, o bien cuando se tiene una alta concentración.

Obtener una medición de la cantidad de microorganismos en un reactor permite por una parte el refinamiento del modelo, con la consecuente mejora en el análisis y diseño del proceso; y por otra, la posibilidad de implementar nuevas técnicas de control y estimación que por falta de instrumentación no habían podido llevarse a la práctica [Schugerl01]. Es por ello que en algunos casos de estudio de este trabajo la biomasa se supone medible.

Para finalizar, los avances en el desarrollo de nuevos sensores y nuevas características tales como la mejora de su confiabilidad, la disminución en su tamaño, el mejoramiento en tiempos de repuesta, la disminución en su costo, etc.; hacen que su uso se vaya generalizando. Pero aún así, hoy día existen sustancias y elementos que son importantes para el desarrollo de un bioproceso y que no son medibles. Es decir, para algunas sustancias no existe un sensor específico o bien existen parámetros del reactor que resulta importante conocer, y los cuales sólo se pueden conocer mediante técnicas de estimación.

2.3. Modelo general de bioprocesos

El modelado de sistemas dinámicos es un punto central en el desarrollo de estrategias de control, y en el caso de modelado de procesos biológicos resulta en una tarea difícil, e inclusive desarrollada de forma heurística en algún sentido [Dochain08]. Esto se debe a que las técnicas convencionales de modelado aplicadas en sistemas de otro tipo, tales como los sistemas eléctricos, mecánicos, térmicos, no se aplican debido a la falta de relaciones y/o leyes bien establecidas que resulten en relaciones cuantitativas de los elementos que conforman el sistema.

Como en todas las áreas, la elección de un modelo lleva consigo una justificación de propósito; es decir, antes de que se elija entre una variedad de posibles modelos se debe establecer un objetivo para lo cual el modelo será utilizado, más allá de la sola representación de un sistema. En el ámbito de modelado de bioprocesos existen dos formas típicas de clasificarlos; una es clasificar a los modelos en estructurados y no estructurados, y las cuales pueden a su vez subdividirse en modelos segregados y no segregados [Nielsen02].

Los modelos estructurados describen a la biomasa con más de una variable, es decir, se considera que el consorcio de microorganismos está conformado por diferentes clases de células, consorcios macromoleculares, enzimas, etc. Estos modelos pueden realizar una descripción cualitativa y bastante detallada que se tiene del proceso desde del ámbito de la biología, y se caracterizan por su alto número de ecuaciones con muchas variables de estado a medir y parámetros a identificar. Los modelos estructurados resultan útiles para una mejor comprensión del proceso, pero debido a su complejidad normalmente son aplicados a procesos donde se considera una sola especie de microorganismos [Hulhoven06]; por lo que su uso queda restringido para aplicar técnicas de control.

Por otra parte los modelos no estructurados están hechos con fines prácticos, en este tipo de aproximación la actividad metabólica de los microorganismos que se encuentran dentro del reactor es considerada desde un enfoque macroscópico y donde la población celular es considerada como homogénea.

La subdivisión de este tipo de modelos en segregados y no segregados depende si a su vez se considera que una población de microorganismos tiene cambios durante el

proceso, tales como envejecimiento o masa celular. El grado de simplificación puede guiarse por las rutas metabólicas del proceso, o bien por el enfoque de número de reacciones que están presentes en el reactor.

Los extremos resultan poco útiles (estructurados vs no estructurados, segregados vs no segregados) para fines de ingeniería, puesto que por un lado el uso de modelos demasiado complejos dificulta la aplicación de técnicas de control (en este caso el uso de observadores); y por el otro la simplificación “*excesiva*” del modelo produce resultados con alta incertidumbre y repetibilidad pobre.

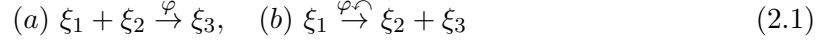
Varias técnicas de modelado han sido aplicadas al modelado de bioprocesos en los últimos años, incluyendo técnicas sistemáticas de modelado mediante gráficas de enlace (Bond Graph) [Roman09]; donde los autores afirman que el hecho de utilizar la técnica de gráficas de Enlace permite realizar un análisis de propiedades estructurales así como también el diseño de observadores para propósitos de control.

Sin embargo, lo mismo resulta con la aproximación realizada veinte años antes por [Bastin90]; donde se utiliza un balance de masas de los principales componentes del proceso desde un enfoque macroscópico y de reacciones presentes.

En la última década se ha dado un crecimiento importante de investigaciones y de aplicaciones donde se utilizan técnicas de modelado de caja negra. Sin embargo, este tipo de modelos deja grandes interrogantes para efectos de avanzar en la comprensión de este tipo de sistemas; puesto que los modelos de caja negra no están relacionados con la física del proceso [Hocalar11, Harmand08].

La técnica de modelado más utilizada para obtener modelos de bioprocesos que tienen lugar en un reactor, con propósitos de control es la aproximación dada por [Bastin90], y la cual se basa en un esquema de reacciones y balance de masas. En este tipo de modelos se toma a la población de microorganismos y a las tasas de reacción como los principales factores para estructurarlo. Esto resulta generalmente en modelos no-estructurados y no-segregados. Es importante hacer notar que el esquema de reacción no representa una relación estequiométrica entre los componentes; simplemente representa una relación cualitativa. Esto permite integrar los procesos químicos, bioquímicos y de crecimiento microbiano en una sola reacción macroscópica.

Siguiendo a [Bastin90], el esquema de reacción puede ser entendido como



donde (2.1,a) es una reacción simple e irreversible que contiene dos reactantes (ξ_1, ξ_2) y un producto (ξ_3), y φ es la tasa de reacción; es decir la velocidad de consumo de los reactantes la cual es igual a la tasa de formación de producto. En las reacciones autocatalíticas un producto es un catalizador de su propia producción (2.1,b).

Los componentes ξ_i de un esquema de reacciones son básicamente de cuatro tipos:

- Población de microorganismos
- Enzimas
- Substratos externos (substratos que son introducidos al reactor desde el exterior)
- Productos/substratos internos (componentes que son producidos por una reacción y pueden posiblemente ser el sustrato de otra reacción)

Para construir un modelo bajo la noción de esquemas de reacción se considera que en el proceso:

- El esquema de reacción del proceso incluye N componentes ξ_i ($i = 1, \dots, N$) y r reacciones ($j = 1, \dots, r$). Las tasas de reacción son denotadas por φ_j ($j = 1, \dots, r$). Es importante hacer notar que las tasas de reacción son cero cuando el sustrato involucrado es cero, o bien cuando el término asociado a los microorganismos es cero, ver [Farza98].
- Las dinámicas de la concentración de cada componente ξ_i son descritas como

$$\frac{d\xi_i}{dt} = \sum_{j \sim i} (\pm) k_{ij} \varphi_j - D\xi_i - Q_i + F_i \quad (2.2)$$

- La notación ($j \sim i$) significa que la suma es tomada sobre las reacciones con índice j la cual involucra el componente con índice i ;

- k_{ij} son los coeficientes de producción y son estrictamente positivos, y son adimensionales, les precede un signo negativo cuando ξ_i es un reactante y signo positivo cuando ξ_i es un producto de la reacción;
- Q_i es la tasa de flujo de salida del componente ξ_i del reactor en forma gaseosa;
- F_i es la tasa másica de alimentación en el reactor del componente ξ_i si es un substrato externo. De otra forma $F_i = 0$
- D es la tasa de dilución, la cual denota la relación $D = Q_{in}/V$, donde Q_{in} es el flujo de entrada y V es el volumen presente en el reactor; D es escalar cuando se trata de un solo reactor y multidimensional cuando son varios reactores.

Como ya se ha mencionado antes, un problema vigente en el modelado de bioprocesos es elegir una función analítica para las tasas de reacción, puesto que es en este término donde se establece una relación cuantitativa entre los microorganismos (células, enzimas, etc.) y su entorno; el cual puede tener cambios significativos durante el proceso.

Aunque en algunas áreas los términos desconocidos o con alta incertidumbre en la parte derecha de la ecuación (2.2) van más allá de las tasas de reacción (como en el caso de tratamiento de aguas residuales donde se desconoce la concentración de nutrientes o substrato en el influente), en la gran mayoría de los casos se puede considerar que la incertidumbre en el modelo se concentra en el término de las tasas de reacción [Dochain03, Nielsen02].

Por lo anterior, en este trabajo se asume que de la parte derecha de la ecuación (2.2) la parte desconocida son precisamente las tasas de reacción. Es decir, se asumirá de aquí en adelante que, cualitativamente, los términos hidráulicos son bien conocidos ($D\xi_i - Q_i + F_i$), mientras que los términos de reacción (φ_j) son los que representan una cantidad incierta en el modelo.

Los principales obstáculos para establecer una función analítica para las tasas de reacción [Bastin90, Chen96, Nielsen02] se pueden resumir en:

1. Determinar los factores biológicos y fisicoquímicos que afectan a las cinéticas de reacción y que deben incorporarse en el modelo;

2. Una vez que se han determinado estos factores, uno debe elegir una descripción analítica apropiada para cada función de cada cinética.

La dificultad de modelar las tasas de reacción se ve reflejada en la gran variedad de modelos analíticos propuestos en la literatura (Monod, Haldane, Contois, etc.). Para una discusión a profundidad del modelado de las tasas de reacción y la complejidad que representa ver [Nielsen02].

En algunos casos, aún cuando se tiene bien asentado el modelo para algunos procesos, la identificación de los parámetros a través de datos obtenidos de forma experimental mediante técnicas de identificación reflejan una gran variabilidad, además del alto costo que esto representa.

Por otra parte, durante el diseño de un biorreactor resulta esencial el conocimiento de las tasas de reacción. En [Najafpour07] se dan ejemplos de procesos donde la cinética de reacción es lo principal a controlar, y los fenómenos de transporte son de importancia menor. La importancia del conocimiento de la cinética de reacción puede enunciarse en los siguientes puntos

- Posible optimización en el diseño del equipo y en la operación del proceso (estrategia de control);
- Supervisión, análisis y diagnóstico del desempeño;
- Obtener conocimiento para mejorar modelos de cinéticas de reacción y de crecimiento.

Dado que en este trabajo se reportan diferentes casos de estudio, es importante mencionar los modos usuales de operación de un biorreactor y sus principales características:

- Lote: En un reactor en modo lote, el sistema tiene un volumen constante, dado que ni se alimenta o se vacía durante la biorreacción. Una cantidad de biomasa es previamente depositada dentro del reactor (inóculo) para posteriormente llenarlo con los nutrientes y substratos. La ventaja de este modo de operación es su simplicidad, además de disminuir la contaminación por microorganismos ajenos al inóculo, contrario a los que ocurre en un sistema abierto. Es por ello que su uso es extensivo en la industria

farmacéutica y de alimentos. La desventaja es la limitación para actuar durante el proceso y la larga duración que requiere para que un proceso termine.

- **Lote-Alimentado:** En el modo lote-alimentado la etapa de lote es finita. Aquí el reactor es alimentado durante una parte significativa del proceso con los nutrientes y substratos. Se comienza con un volumen inicial, hasta llegar a un volumen final (generalmente el llenado del reactor). El reactor se alimenta durante la biorreacción para favorecer el crecimiento de microorganismos, la producción del producto ó la degradación de un contaminante; lo cual favorece las reacciones de la manera deseada.
- **Continuo:** El volumen del reactor se mantiene constante, haciendo que el flujo de entrada sea igual al flujo de salida. Este modo de operación presenta una dinámica “enriquecida” en comparación con los dos anteriores. Una de sus ventajas principales es la posibilidad de operar en reactores pequeños, sin perder productividad (de productos o de microorganismos). La desventaja que tiene con respecto a los otros dos procesos es el hecho de que en estado pseudo estacionario, la concentración de compuestos en el efluente será la que continuamente hay en el reactor, lo cual puede limitar las tasas de crecimiento o biodegradación.

Capítulo 3

Observadores y estimadores basados en el Algoritmo Genérico de Segundo Orden (AGSO)

3.1. Modos deslizantes de orden superior

Los modos deslizantes, los cuales pertenecen a la categoría de sistemas de estructura variable (VSS, por sus siglas en inglés), ha tenido un interés creciente en la comunidad de control automático durante las últimas tres décadas. Los modos deslizantes se caracterizan por la naturaleza discontinua de las acciones de control, tal que cada canal utilizado para retroalimentación conmuta entre dos diferentes estructuras del sistema; confinando su comportamiento a una superficie donde su dinámica es estable, resultando en un nuevo tipo de comportamiento del sistema llamado modo deslizante [Young99].

El orden del modo deslizante [Levant05b], usualmente, caracteriza el grado de suavidad en la vecindad de la superficie del modo deslizante. Por ejemplo, si el objetivo es mantener una restricción dada por una igualdad de una función suave σ a cero, el orden del modo deslizante es el número de las derivadas totales continuas de σ (incluyendo a la derivada cero) en la vecindad del modo. Entonces, el n -ésimo orden el modo deslizante es determinado por las igualdades

$$\sigma = \dot{\sigma} = \ddot{\sigma} = \dots = \sigma^{n-1} = 0$$

formando una condición n -dimensional sobre el estado de la dinámica del sistema.

Los modos deslizantes estándar pueden ser caracterizados como de primer orden, es decir la primera derivada $\dot{\sigma}$ del sistema es discontinua. Los modos deslizantes de primer orden son conocidos por su robustez y precisión con respecto a varias clases de perturbaciones tanto internas como externas. Sin embargo están restringidos al caso en el cual la salida tiene grado relativo 1, es decir la inyección discontinua aparece en $\dot{\sigma}$. En este caso, la alta frecuencia de conmutación que produce el modo deslizante revela la principal desventaja del método: el efecto de *chattering*. Este es un efecto indeseable puesto que puede producir vibraciones de alta frecuencia en el sistema controlado.

El efecto de *chattering* es la conmutación del sistema en una región acotada sobre la superficie de deslizamiento; y es causado por el aumento en el grado relativo del sistema con respecto a la entrada de control. Es decir, teóricamente la conmutación debe ser de frecuencia infinita pero su implementación es necesariamente no instantánea debido a las limitaciones físicas del sistema. En principio se puede lograr un desempeño perfecto del sistema, aún en presencia de perturbaciones acotadas o incertidumbre paramétrica, a costa de una actividad de conmutación muy alta de los actuadores [Slotine91]. Lo que en algunas aplicaciones resulta indeseable y/o imposible.

Para eliminar o disminuir el efecto de *chattering* se han propuesto varias soluciones, las cuales se basan en la idea de cambiar la dinámica del sistema en una vecindad cercana de la superficie discontinua para evitar la discontinuidad real y al mismo tiempo preservar las principales propiedades del sistema de control. Esto se ha realizado de diferentes formas; una de ellas es suavizando la ley de conmutación (que usualmente está dada por la función signo), otra es el uso del llamado control equivalente (filtrado de la señal de control) que es usado para disminuir la componente discontinua de la señal de control; otra más es el llamado método de deslizamiento-por-sector adecuado para controlar sistemas lineales invariantes en el tiempo, donde el cambio en la velocidad del control es acotado artificialmente. Sin embargo, en todos ellos, la precisión y robustez del modo deslizante se ve afectada [Levant03].

En contraste, los modos deslizantes de alto orden generalizan la idea básica de los modos deslizantes estándar, actuando sobre la derivada más alta de la desviación del sistema (error) de la restricción, en lugar de influir la primera derivada de la desviación del sistema (error) como en el caso de modos deslizantes estándar.

Los modos deslizantes de orden superior aparecen algunas veces en sistemas con control de modos deslizantes tradicionales o bien son deliberadamente introducidos debido a que se ha encontrado que la convergencia en tiempo finito de los modos deslizantes de orden superior preservan las características de los modos deslizantes de primer orden y además pueden mejorarlos si son diseñados adecuadamente, disminuyendo el efecto de *chattering* [Moreno08, Levant03].

En la última década las técnicas de modos deslizantes de orden superior se han extendido al problema de diferenciación y de diseño de observadores. En este contexto, las desventajas de los modos deslizantes no resultan en un detrimento del sistema ([Spurgeon08]), puesto que la conmutación a altas frecuencias de la señal de error, requerida para maximizar la robustez del observador, puede ser establecida en la práctica sin una afectación que comprometa el desempeño del sistema de control.

Dentro de las principales características de observadores y diferenciadores basados en modos deslizantes de orden superior, se resaltan las siguientes:

- Robustez (insensibilidad) ante incertidumbres,
- Convergencia exacta y en tiempo finito,
- Disminución del efecto de *chattering* (con respecto a modos deslizantes de primer orden),
- Identificación de parámetros constantes y reconstrucción de entradas desconocidas de forma exacta,
- No es necesario diseñar la superficie de deslizamiento.

La principal desventaja de los modos deslizantes de orden superior es el incremento de información requerida para su implementación; *grosso modo*, cualquier modo deslizante

de n -ésimo orden que mantenga a $\sigma = 0$ necesita que $\sigma, \dot{\sigma}, \dots, \sigma^{n-1}$ estén disponibles. En particular, para modos deslizantes de orden $n = 2$, la única exclusión es el llamado “Super-Twisting Algorithm” introducido por [Levant93]; el cual sólo necesita la medida de σ [Fridman02].

3.2. Observador Super-Twisting Generalizado (OSTG)

El Algoritmo Super-Twisting (STA, por sus siglas en inglés) inicialmente desarrollado para propósitos de control, ha sido utilizado también para el diseño de diferenciadores [Levant98] y observadores robustos [Fridman07, Davila05]. Inicialmente el análisis de convergencia del algoritmo se llevó a cabo mediante criterios geométricos [Levant93, Davila05, Levant07] o por medio de propiedades de homogeneidad [Levant05a, Pisano07] del algoritmo. Sin embargo, estos métodos restringen el análisis y diseño del algoritmo ya que no permiten la determinación del tiempo de convergencia [Moreno11].

Recientemente se han propuesto métodos de análisis mediante el uso de funciones de Lyapunov fuertes [Moreno08, Polyakov09], haciendo posible el análisis de convergencia y también la determinación del tiempo de convergencia. De particular interés son las funciones de Lyapunov fuertes propuestas en [Moreno08, Moreno09], dado que son similares a funciones de Lyapunov cuadráticas usadas en sistemas lineales.

Además de lo anterior, el STA es extendido para una clase de perturbaciones y/o incertidumbres no contempladas en el algoritmo original. El “Algoritmo Super-Twisting Generalizado” (ASTG) propuesto en [Moreno09] contempla la adición de términos lineales lo que hace posible que trate con perturbaciones crecientes.

Posteriormente se reportó el “Algoritmo Genérico de Segundo Orden” (AGSO) en [Moreno11], en el cual se basa este trabajo; y que para efectos de observación se puede explicar considerando el siguiente sistema de segundo orden:

$$\left. \begin{aligned} \dot{x}_1 &= f_1(y, t) + x_2 - \delta_1(x, u, t) \\ \dot{x}_2 &= f_2(y, t) - \delta_2(x, u, t) \\ y &= x_1 \end{aligned} \right\} \Sigma \quad (3.1)$$

donde y es medible, x_1, x_2 son las variables de estado a ser estimadas, $f_1(y, t), f_2(y, t)$

son funciones conocidas y $\delta_1(x, u, t), \delta_2(x, u, t)$ son términos de perturbación desconocidos globalmente acotados.

Ahora, considerando el siguiente observador, al cual denominaremos como “Observador Super-Twisting Generalizado” (OSTG), el cual está dado por:

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{x}}_1 &= f_1(y, t) + \hat{x}_2 - l_1\phi_1(\hat{x}_1 - x_1) \\ \dot{\hat{x}}_2 &= f_2(y, t) - l_2\phi_2(\hat{x}_1 - x_1) \end{aligned} \right\} \Omega \quad (3.2)$$

donde \hat{x}_i , $i = 1, 2$, son variables escalares a ser estimadas, y l_i son ganancias positivas a ser diseñadas. Definiendo al error como $e = \hat{x} - x$ y las no linealidades ϕ_1, ϕ_2 dadas por

$$\begin{aligned} \phi_1(e_1) &= m_1|e_1|^p \text{sign}(e_1) + m_2|e_1|^q \text{sign}(e_1) \\ \phi_2(e_1) &= m_1^2 p |e_1|^{2p-1} \text{sign}(e_1) + m_1 m_2 (p+q) |e_1|^{p+q-1} \text{sign}(e_1) + m_2^2 q |e_1|^{2q-1} \text{sign}(e_1) \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde $m_1, m_2 \geq 0$ son dos constantes no negativas y $q \geq 1 \geq p \geq \frac{1}{2}$ son números reales; nótese que las no linealidades mantienen la relación $\phi_2 = \phi_1 \phi_1'$.

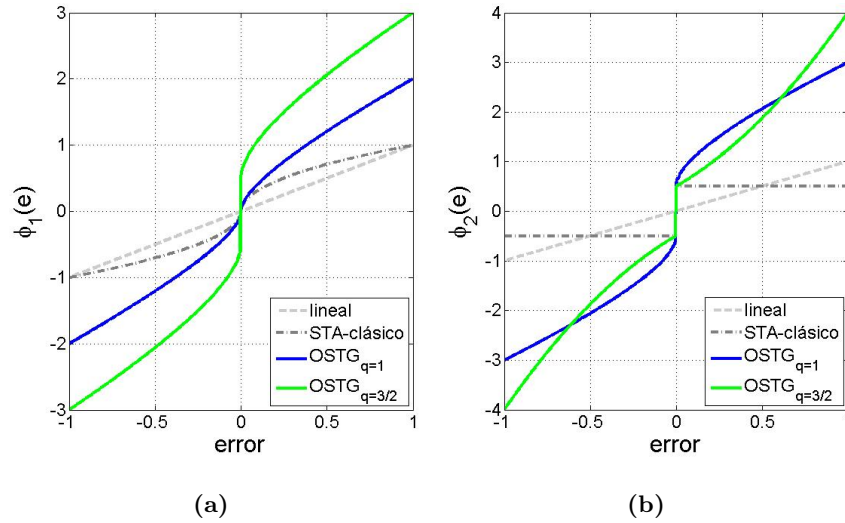


Figura 3.1: Comportamiento de los términos no lineales en función del error, (a) término ϕ_1 , (b) término ϕ_2

Al observador (3.2) se le puede ver como un observador de ganancia variable; puesto que en (3.3) con $1/2 \leq p \leq 1$ y $1 \leq q$, se tienen dos clases de términos estabilizantes (de bajo orden dados por p y de alto orden dados por q). Los términos de corrección alto orden proveen al algoritmo de mayor fuerza de atracción cuando las trayectorias están muy

alejadas del punto de equilibrio, puesto que son más fuertes que los términos no lineales de bajo orden. En contraparte, los términos de bajo orden proveen la convergencia en tiempo finito, y atraen las trayectorias del sistema con mayor fuerza (en comparación con los términos de alto orden) cuando se encuentran cercanas al origen (ver Figura 3.1).

La dinámica del error de observación está dada por

$$\left. \begin{aligned} \dot{e}_1 &= -l_1\phi_1(e_1) + e_2 + \delta_1(x, u, t) \\ \dot{e}_2 &= -l_2\phi_2(e_1) + \delta_2(x, u, t) \end{aligned} \right\}. \quad (3.4)$$

la cual corresponde al llamado “Algoritmo Genérico de Segundo Orden” (AGSO), reportado en [Moreno11]. Como puede notarse el observador OSTG (3.2) tiene en total cuatro parámetros a diseñar, (p, q, m_1, m_2) y dos valores de ganancias (l_1, l_2) para los términos de corrección. Lo que resulta en una ventaja debido a su gran flexibilidad; pero no es algo simple debido a las múltiples combinaciones de los parámetros y ganancias que se deben sintonizar.

Mediante la configuración apropiada de los términos m_1, m_2, p, q en la ecuación (3.4) se pueden recobrar casos particulares de gran importancia, mostrados en la Tabla (3.1).

Caso particular AGSO	(m_1, m_2, p, q)	$\phi_1(e_1), \phi_2(e_1)$
Algoritmo lineal	$(0, 1, p, 1)$	$\phi_1(e_1) = e_1,$ $\phi_2(e_1) = e_1$
STA-clásico	$(1, 0, \frac{1}{2}, q)$	$\phi_1(e_1) = e_1 ^{\frac{1}{2}} \text{sign}(e_1),$ $\phi_2(e_1) = \frac{1}{2} \text{sign}(e_1)$
GSTA	$(1, 1, \frac{1}{2}, 1)$	$\phi_1(e_1) = e_1 ^{\frac{1}{2}} \text{sign}(e_1) + e_1$ $\phi_2(e_1) = \frac{1}{2} \text{sign}(e_1) + \frac{3}{2} e_1 ^{\frac{1}{2}} \text{sign}(e_1) + e_1$

Tabla 3.1: Casos particulares AGSO

Los tipos de convergencia y estabilidad (asintótica) del AGSO dependen de los valores de sus parámetros. Considerando el origen $e = 0$ del sistema (3.4) es (localmente) globalmente con las siguientes definiciones:

- **Estable en tiempo finito**, si todas las trayectorias que comienzan en (una vecindad de $e = 0$) \mathbb{R}^2 convergen a $e = 0$ en tiempo finito.

- **Exponencialmente estable**, si todas las trayectorias que comienzan en (una vecindad de $e = 0$) \mathbb{R}^2 convergen a $e = 0$ exponencialmente.
- **Asintóticamente estable**, si todas las trayectorias que comienzan en (una vecindad de $e = 0$) \mathbb{R}^2 convergen a $e = 0$ asintóticamente.
- **Uniformemente estable**, si todas las trayectorias que comienzan en \mathbb{R}^2 convergen a una vecindad de $e = 0$ en tiempo finito, y la convergencia en tiempo es uniformemente (por encima) acotada con respecto a la condición inicial.
- **Robustamente estable**, si todas las trayectorias que comienzan en (una vecindad de $e = 0$) \mathbb{R}^2 convergen a $e = 0$ para una familia de perturbaciones desvanecientes en el origen.
- **Exactamente estable**, si todas las trayectorias que comienzan en (una vecindad de $e = 0$) \mathbb{R}^2 convergen a $e = 0$ en tiempo finito, para una familia de perturbaciones no desvanecientes en el origen.
- **Prácticamente estable**, si todas las trayectorias que comienzan en (una vecindad de $e = 0$) \mathbb{R}^2 convergen a una vecindad de $e = 0$ en tiempo finito, para una familia de perturbaciones no desvanecientes en el origen.

En la Tabla 3.2 se resumen los tipos de convergencia del AGSO con las definiciones antes dadas. El tipo de convergencia del AGSO depende básicamente de los valores de p, q , tanto para el caso nominal como para el caso perturbado; y hay que notar que características de primera importancia como uniformidad en el tiempo de convergencia con respecto a condiciones iniciales [Cruz-Zavala10a, Cruz-Zavala10b], pueden ser obtenidas mediante la configuración apropiada [Moreno11].

Los valores de las ganancias (l_1, l_2) tales que las condiciones cumplen con el análisis de estabilidad, se divide en dos partes. Para el caso nominal, es decir sin perturbaciones, el análisis se realiza mediante ecuaciones algebraicas de Lyapunov (ALE, por sus siglas en inglés). Para el caso perturbado se hace uso de desigualdades algebraicas de Riccati (ARI, por sus siglas en inglés).

Término de bajo orden p	Término de alto orden q	Tipo de estabilidad	
$p = 1$	$q = 1$	Exponencial Robusta	No Uniforme Práctica
$\frac{1}{2} < p < 1$	$q = 1$	Tiempo finito Robusta	No uniforme Práctica
$p = \frac{1}{2}$	$q = 1$	Tiempo finito Exacta	No uniforme Práctica
$p = 1$	$q > 1$	Exponencial Robusta	Uniforme Práctica
$\frac{1}{2} < p < 1$	$q > 1$	Tiempo Finito Robusta	Uniforme Práctica
$p = \frac{1}{2}$	$q > 1$	Tiempo finito Exacta	Uniforme Práctica

Tabla 3.2: Tipos de convergencia del AGSO

La elección de ganancias, para el caso nominal, cuando en (3.4) se tiene $\delta_i = 0$, las condiciones de convergencia dadas en [Moreno11], se limitan a que $l_1, l_2 > 0$. Para el caso en el que $\delta_1 = 0$ y $\delta_2 \neq 0$, las ganancias en (3.2) se pueden elegir como

- La ganancia $l_2 > c$ y $l_1^2 > 2l_2$
- O bien seleccionar l_1 y l_2 de tal forma que se cumpla que

$$l_1^2(l_2 - \frac{1}{4}l_1^2) > c^2, \quad l_2 > \frac{1}{2}l_1^2 + 1$$

donde c es una cota para δ_2

Debido a que el OSTG es un observador basado en un algoritmo de modos deslizantes de segundo orden (en concreto del algoritmo STA-clásico, aunque no se limita a él) hereda las características de convergencia en tiempo finito y robustez en términos de estabilidad. Pero como se trata de un observador en el cual han sido incluidos términos de alto orden, tiene propiedades y características únicas como:

- Una mayor velocidad de convergencia gracias a la adición de términos de alto orden,
- Robustez mejorada (en términos de estabilidad); puesto que la clase de perturbaciones permitidas es extendida a perturbaciones monótonas crecientes y/o no desvanecientes en el origen,

- Convergencia exacta, en tiempo finito y uniforme con respecto a condiciones iniciales
- Flexibilidad en la configuración de ganancias y parámetros, que hace posible recobrar casos particulares como el STA-clásico y algoritmos lineales,
- Funciones de Lyapunov reportadas, que demuestran las propiedades de convergencia y estabilidad tanto en el caso nominal como en el caso en el que se tengan perturbaciones,
- Estimación de entradas desconocidas (perturbaciones) de forma exacta.

3.3. Observador OSTG para estimar perturbación

Un caso relevante y sobre el que se fundamenta este trabajo, es que dadas las condiciones en el sistema Σ , se puede estimar tanto al estado x_1 (medible) y a la perturbación (entrada desconocida) δ_1 de forma exacta y en tiempo finito. Los observadores por modos deslizantes de primer orden, estiman de forma robusta los estados cuando las perturbaciones son de grado relativo uno, pero las perturbaciones no pueden ser reconstruidas exactamente.

Para reconstruir la perturbación de forma exacta es necesario utilizar modos deslizantes de segundo orden, siempre y cuando se cumpla que el grado relativo de la perturbación es 1 con respecto al estado conocido [Moreno10].

En concreto, aquí nos interesa el caso particular en el que el sistema (3.1) toma la forma:

$$\dot{x}_1 = f_1(y, t) - \delta_1(x, u, t) \quad (3.5)$$

donde para poder reconstruir la perturbación $\delta_1(x, u, t)$ se deben cumplir las siguientes condiciones

- Grado relativo 1 de $\delta_1(x, u, t)$ con respecto a x_1
- La derivada de la perturbación es acotada, i.e. se cumple que

$$-c \leq \dot{\delta}_1(x, u, t) \leq c$$

donde c es una constante.

Entonces, en el sistema (3.5) se puede reconstruir a la perturbación y al estado de forma exacta y en tiempo finito con el siguiente OSTG:

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{x}}_1 &= -l_1\phi_1(\hat{x}_1 - x_1) + f_1(y, t) - \hat{\delta}_1 \\ \dot{\hat{\delta}}_1 &= -l_2\phi_2(\hat{x}_1 - x_1) \end{aligned} \right\} \quad (3.6)$$

donde se considera a la derivada de la perturbación como una dinámica extendida del sistema (3.5). Definiendo el error como $\tilde{x}_1 = \hat{x}_1 - x_1$, la dinámica del error está dada por

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{x}}_1 &= -l_1\phi_1(\tilde{x}_1) - \hat{\delta}_1 + \delta_1 \\ \dot{\tilde{\delta}}_1 &= -l_2\phi_2(\tilde{x}_1) + \dot{\delta}_1 \end{aligned} \quad (3.7)$$

En (3.7) se puede ver explícitamente que la inyección de salida del error en el canal \tilde{x}_1 corresponde al error que se comete en la reconstrucción de la perturbación δ_1 , por lo que su compensación permite dos cosas: la reconstrucción exacta y en tiempo finito del estado x_1 y a su vez la reconstrucción de la perturbación.

Por otra parte es hacer notar que los observadores de alta ganancia (OAG) son casos particulares del OSTG utilizado en este trabajo. La importancia de este hecho, como se verá en los siguientes apartados, radica en que trabajos previos con el mismo objetivo que el que se sigue aquí (estimar las tasas de reacción en bioprocesos) han sido reportados en [Farza98, Farza00, Selisteanu09, Selisteanu10].

3.4. Estimador Super-Twisting Variante (ESTV)

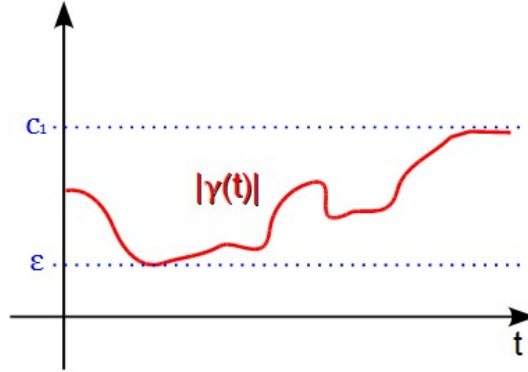
Como una contribución original de este trabajo, se reporta a continuación el estimador super-twisting variante (ESTV). Para motivar la presentación del ESTV, consideremos nuevamente el sistema (3.5), el cual está dado por

$$\dot{x}_1 = f_1(y, t) - \delta_1(x, u, t)$$

Suponiendo que se tiene algún conocimiento sobre la perturbación; es decir, consideremos el caso en el que

$$\delta_1(t) = \gamma(t)\theta(t)$$

donde $\gamma(t)$ es conocido y variante en el tiempo, mientras que $\theta(t)$ es desconocido y consideremos que es de interés obtener un estimado de $\theta(t)$.

Figura 3.2: Condición de signo definido para $\gamma(t)$

Con la aproximación mediante OSTG (3.6), se puede obtener un estimado de la perturbación $\hat{\delta}_1(t)$, por lo que para obtener un estimado de $\theta(t)$ se tiene que hacer

$$\hat{\theta}(t) = \frac{\hat{\delta}_1(t)}{\gamma(t)} \quad (3.8)$$

por lo que si $\gamma(t) = 0$, se tiene una singularidad en la estimación de $\hat{\theta}$.

Una forma de evitar la singularidad en la estimación de θ es utilizar un estimador de parámetros. Lo que aquí se propone es utilizar un ESTV, el cual difiere de lo hasta aquí mencionado puesto que su objetivo es estimar un parámetro variante en el tiempo, y lo que considera como regresor es también variante en el tiempo y cumple con la característica de que es de signo definido, ver figura (3.2).

Retomando, se considera un sistema de primer orden (escalar) de la forma

$$\dot{x} = \gamma(t)\theta(t) + f(x, t) \quad (3.9)$$

donde x es el estado, $f(x, t)$ es una función, $\gamma(t)$ es el regresor, todos ellos son considerados como conocidos, y donde $\theta(t)$ es un parámetro variante en el tiempo y es desconocido, y asumiendo que se cumplen las siguientes condiciones:

C1 El regresor es de signo definido y acotado, $0 < \epsilon < \gamma(t) \leq c_1$,

C2 La derivada $\dot{\theta} = \delta_\theta$, es acotada por una constante $-c_2 \leq \delta_\theta \leq c_2$.

El objetivo es obtener un estimado del estado x y del parámetro $\theta(t)$. Para ello se considera un ESTV, el cual es enunciado de manera formal mediante el siguiente teorema:

Teorema 3.1 *Considerando el sistema (3.9) con x y γ conocidos y asumiendo que las condiciones **C1** y **C2** se cumplen; es posible obtener un estimado de $\theta(t)$ de forma exacta y en tiempo finito con el ESTV dado por*

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{x}} &= -l_1\phi_1(\hat{x} - x) + \gamma(t)\hat{\theta}(t) + f(x, t) \\ \dot{\hat{\theta}} &= -l_2\phi_2(\hat{x} - x)\gamma(t) \end{aligned} \right\} \Omega_{ESTV}$$

donde l_1, l_2 son ganancias a sintonizar, y los términos de corrección del error no lineales $\phi_1(\tilde{x}_1), \phi_2(\tilde{x}_1)$ están definidos como en (3.3) con $p = 1/2$. Definiendo al error como $\tilde{x} = \hat{x} - x$ y $\tilde{\theta} = \hat{\theta} - \theta$, su dinámica está dada por

$$\left. \begin{aligned} \dot{\tilde{x}} &= -l_1\phi_1(\tilde{x} - x) + \gamma(t)\tilde{\theta}(t) \\ \dot{\tilde{\theta}} &= -l_2\phi_2(\tilde{x} - x)\gamma(t) - \delta_\theta \end{aligned} \right\} E_{ESTV}$$

Para la prueba de convergencia, se remite al lector al apéndice A.

Para mostrar la originalidad del algoritmo ESTV consideremos diferentes restricciones para el regresor $\gamma(t)$ y la dinámica del error E_{ESTV} , tanto en el caso sin perturbación ($\delta_\theta = 0$), como en el caso perturbado ($\delta_\theta \neq 0$); lo que da lugar a los siguientes casos:

OSTG Si el regresor es constante, es decir de signo definido y cumple con $\epsilon = c_1$, se tiene al OSTG. Y la estimación se da

- con o sin perturbación, de forma exacta y en tiempo finito

ESTV En el caso en el que $\gamma(t)$ cumple con la condición de signo definido, se tiene el caso del ESTV, y se cumple que

- con o sin perturbación la estimación es exacta y converge en tiempo finito

FTPE En el caso que $\gamma(t)$ cumpla con la condición de excitación persistente

$$\frac{1}{T_0} \int_{t_2}^{t_2+\delta_0} |\gamma(t)| d\tau \geq \epsilon_0 \quad (3.10)$$

donde T_0, ϵ_0 y δ_0 son constantes positivas con $t_2 \in [t, t + T_0]$; entonces se tiene el caso del estimador de parámetros en tiempo finito (FTPE, por sus siglas en inglés) reportado en [Guzmán11], y la estimación de parámetros

- sin perturbación, es exacta y en tiempo finito
- con perturbación, se converge a una vecindad del origen

Como se puede observar de los casos anteriores, la diferencia radica en qué restricciones se le pide cumplir al regresor $\gamma(t)$. Las condiciones sobre $\gamma(t)$ en el caso del ESTV son más restrictivas que en el caso del FTPE, lo que permite obtener mayor robustez en la

estimación paramétrica. Debe notarse que aún en el caso perturbado la convergencia se da de forma exacta y en tiempo finito, de ahí la originalidad del algoritmo.

Por otra parte, las características principales del ESTV teniendo como referencia al OSTG, son:

- No desprecia el conocimiento que se pueda tener acerca de la estructura de la perturbación,
- La estimación del parámetro es de forma exacta y en tiempo finito aún en presencia de perturbaciones,
- Una posible calibración de las ganancias y parámetros más fina, en comparación con el OSTG,
- El uso del ESTV, en lugar del OSTG, evita la posible singularidad (3.8) si se requiere estimar un parámetro asociado a la entrada desconocida (perturbación).

Vale la pena hacer una aclaración sobre la condición C1 impuesta a $\gamma(t)$: dadas las propiedades de los sistemas que se toman en cuenta en este trabajo (bioprocesos), la condición de signo definido la mayor parte de las veces se cumple. Como se verá más adelante, los términos que conforman al regresor son concentraciones presentes en el proceso (biomasa, substratos, productos) y en condiciones de operación normales siempre son positivas. En términos de teoría de control, la condición de excitación persistente se reduce, en el caso de sistemas escalares, a esta condición y en el caso de los sistemas que aquí se trata generalmente se cumple.

Capítulo 4

Observadores OSTG para estimar tasas de reacción en bioprocesos

En este capítulo se presentan y desarrollan los principales aportes de este trabajo. Primero, para introducir la idea general se presenta un ejemplo de motivación donde se exploran las diferentes posibilidades de estimación que se pueden realizar dados diferentes grados de conocimiento de las tasas de reacción. Este ejemplo es tomado de la literatura y es un sistema sencillo de crecimiento microbiano.

Posteriormente se realiza la aplicación de observadores tipo OSTG para estimar las tasas de reacción utilizando el modelo general de bioprocesos, dado en la sección 2.3 de este trabajo; y se hace notar cómo el esquema con observadores de alta ganancia es un caso particular del esquema aquí propuesto.

Una vez estimadas las tasas de reacción se propone un observador para estimar los estados no medidos, diferente a un observador asintótico, en el que la estimación de concentraciones (estados no conocidos) utiliza los estimados de las tasas de reacción.

Después, se propone cómo estimar las tasas de reacción específicas aplicando estimadores tipo ESTV en el caso de un sistema escalar; y lo cual requiere suponer un conocimiento mínimo sobre la estructura de las tasas de reacción.

4.1. Ejemplo de motivación: Crecimiento microbiano

El modelo considerado como ejemplo de motivación está relacionado a una población que involucra sólo un tipo de biomasa (microorganismos), y su crecimiento está sujeto a un sólo sustrato en un biorreactor agitado de forma uniforme. El modelo matemático del proceso está descrito por las siguientes ecuaciones obtenidas mediante balances de masa y energía [Farza00]:

$$\begin{cases} \dot{X} &= \mu X - DX, \\ \dot{S} &= -k\mu X + D(S_{in} - S) \end{cases} \quad (4.1)$$

donde X y S denotan la concentración de biomasa y sustrato respectivamente, μ es la tasa de crecimiento específica, k es un coeficiente de producción, D es la tasa de dilución (entrada de control) y finalmente S_{in} es la concentración de sustrato en la entrada.

Como el modelo describe un proceso de crecimiento microbiano, la tasa de reacción es equivalente al producto de μ y la cantidad de biomasa en el reactor X ; por lo que se puede establecer la siguiente equivalencia

$$\varphi = \mu X \quad (4.2)$$

esta característica es utilizada en el planteamiento de los estimadores ESTV, como se ve más adelante.

La tasa de crecimiento específico μ es en general una función altamente no-lineal que depende de factores ambientales y de la concentración sustancias que se producen en el reactor, por lo que el modelo analítico y sus coeficientes tienen una alta incertidumbre. Para este ejemplo en particular se considera un proceso de fermentación con un solo sustrato y una sola población de microorganismos, y sólo para propósitos de simulación se asume una ley de crecimiento tipo Monod:

$$\mu = \frac{\mu_{max} S}{K_S + S} \quad (4.3)$$

donde μ_{max} es la máxima tasa de crecimiento específico y K_S es la constante de saturación.

Del modelo del sistema (4.1) se puede inferir la importancia del conocimiento de μ para propósitos de control y optimización del proceso, ya que relaciona la dinámica de la concentración de la biomasa con la concentración de sustrato.

El hecho de plantear un modelo analítico para μ , como el que se plantea en (4.3) puede conllevar a la degradación del modelo entero. Es por ello que se propone utilizar estimadores donde se considera a μ como una cantidad incierta en el modelo.

En este ejemplo se siguen dos objetivos: la reconstrucción de la tasa de crecimiento específico μ ; y la estimación del estado S , considerando que son desconocidos y/o no medibles. Para esto se propone utilizar 2 estrategias:

- OSTG, con el que se reconstruye la tasa de reacción como una entrada desconocida (perturbación)
- ESTV, con el que se reconstruye la tasa de crecimiento específica μ (parámetro variante en el tiempo)

Para efectos de comparación, el resultado del ESTV se compara con el observador de alta ganancia (OAG) propuesto en [Farza00], que es de donde se toma este ejemplo. La estimación del estado no medido S se compara el resultado con un observador asintótico (OA).

Condiciones Iniciales	Valores de parámetros
$X(0) = 1.41(\text{g/l})$	$k = 2$
	$K_S = 5(\text{g/l})$
	$S_{in} = 5(\text{g/l})$
$S(0) = 2.17(\text{g/l})$	$\mu_{max} = 0.33(\text{h}^{-1})$

Tabla 4.1: Ejemplo de motivación: condiciones iniciales y valores de parámetros en el modelo

Las condiciones de simulación para el modelo son: tiempo de simulación de 120(h), la tasa de dilución D es una señal cuadrada como la que se muestra en la figura (4.1(a)); las condiciones iniciales de las variables de estado, así como de los parámetros se muestran en la tabla (4.1). En el caso en que se considere ruido en la medición de biomasa, a la señal X se le suma ruido gaussiano con media cero y con magnitud del 6% del máximo valor de la señal como se muestra en la figura (4.1(b)).

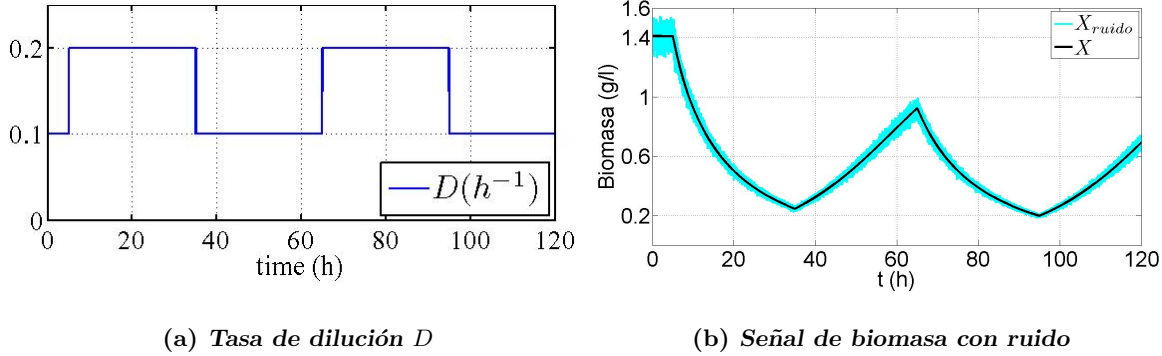


Figura 4.1: Condiciones de modelo: modelo de crecimiento microbiano (a), (b)

4.1.1. Diseño de Observadores OSTG y ESTV para estimar tasa de reacción específica

Para realizar el primer objetivo de este ejemplo se proponen a continuación dos formas de estimar la tasa de reacción específica μ . La primera corresponde a cuando no se supone ningún tipo de conocimiento sobre la tasa de reacción y se aplica un OSTG. La segunda, cuando se plantea un conocimiento mínimo sobre la estructura de la tasa de reacción como el dado por la relación (4.3) y se aplica un ESTV para estimar μ .

Diseño de Observador OSTG

Como primera posibilidad se plantea un observador OSTG para el sistema (4.1) tomando a la tasa de reacción (φ) como entrada desconocida. Es decir se toma a la tasa de reacción como una cantidad desconocida en el modelo, y por ende como una entrada desconocida para efectos de diseño del observador. Considerando el sistema reducido

$$\left. \begin{aligned} \dot{X} &= \varphi - DX, \\ \dot{\varphi} &= \delta(t) \end{aligned} \right\} \quad (4.4)$$

donde se toma a la derivada de la tasa de reacción como un estado extendido. Las condiciones para poder implementar un observador OSTG que estime al estado X y a φ son:

- Grado relativo 1, de φ (perturbación) respecto a X (estado conocido)
- La derivada de φ es acotada por una constante

La primera condición, la del grado relativo, se cumple por las condiciones estructurales del modelo. La segunda condición, una cota para la derivada de la tasa de reacción, se asume que se cumple debido a las limitaciones físicas del sistema.

Ya que ambas condiciones se cumplen en (4.4), se plantea el siguiente OSTG

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{X}} &= -l_1\phi_1(\tilde{X}) + \hat{\varphi} - DX, \\ \dot{\hat{\varphi}} &= -l_2\phi_1(\tilde{X}) \end{aligned} \right\} \Omega_1 \quad (4.5)$$

donde el error está definido como $\tilde{X} = \hat{X} - X$ y $\tilde{\varphi} = \hat{\varphi} - \varphi$, por lo que la dinámica del error de observación está dada por

$$\left. \begin{aligned} \dot{\tilde{X}} &= -l_1\phi_1(\tilde{X}) + \tilde{\varphi} \\ \dot{\tilde{\varphi}} &= -l_2\phi_2(\tilde{X}) + \delta(t) \end{aligned} \right\} \quad (4.6)$$

lo que corresponde al AGSO, donde $\phi_1(\tilde{X})$ y $\phi_2(\tilde{X})$, están dadas como en (3.3) por

$$\begin{aligned} \phi_1(\tilde{X}) &= m_1|\tilde{X}|^p \text{sign}(\tilde{X}) + m_2|\tilde{X}|^q \text{sign}(\tilde{X}) \\ \phi_2(\tilde{X}) &= m_1^2 p |\tilde{X}|^{2p-1} \text{sign}(\tilde{X}) + m_1 m_2 (p+q) |\tilde{X}|^{p+q-1} \text{sign}(\tilde{X}) + m_2^2 q |\tilde{X}|^{2q-1} \text{sign}(\tilde{X}) \end{aligned}$$

Como se requiere estimar el parámetro μ , se puede hacer uso de la relación (4.2), por lo que el estimado de la tasa de crecimiento está dado por

$$\hat{\mu} = \frac{\hat{\varphi}}{X} \quad (4.7)$$

La ecuación (4.7) presenta un inconveniente, debido a que cuando $X = 0$ se tiene una singularidad.

Por otra parte, hay que hacer notar que bajo este esquema, sólo se requiere que la derivada de la tasa de reacción sea acotada para obtener su estimado. En el caso en el se tengan coeficientes de producción desconocidos, se pueden incluir en el término desconocido a estimar.

ESTV para estimar tasa de reacción específica

Si se tiene un conocimiento mínimo de las tasas de reacción como el establecido por la relación (4.2), donde se asume que la tasa de reacción asociada a la biomasa es proporcional a su concentración (autocatálisis); entonces la tasa de crecimiento específica

(el parámetro μ) puede ser estimado como un parámetro variante en el tiempo. Teniendo presente lo anterior, se toma el siguiente modelo reducido:

$$\left. \begin{aligned} \dot{X} &= \mu X - DX, \\ \dot{\mu} &= \delta_{\mu}(t) \end{aligned} \right\} \quad (4.8)$$

donde la biomasa X es medible, y μ es el parámetro variante en el tiempo a estimar con el ESTV dado por

$$\left. \begin{aligned} \dot{\tilde{X}}_1 &= -l_1\phi_1(\tilde{X}) + \hat{\mu}X - DX, \\ \dot{\hat{\mu}} &= -l_2\phi_2(\tilde{X}_1)X \end{aligned} \right\} \Omega 2 \quad (4.9)$$

En este caso X es escalar y es considerado como el regresor; l_1, l_2 son ganancias a calibrar y las funciones ϕ_1, ϕ_2 están definidas como en (3.3).

Es importante notar que en este caso la tasa de reacción específica es obtenida de forma directa; evitando la singularidad de la relación (4.7). Como restricción se tiene la condición de excitación persistente para X que es considerado como el regresor en (4.9), pero que en el caso escalar se reduce a la positividad de la concentración de biomasa y que en condiciones de operación normales siempre se satisface.

Resultados de estimación con OSTG y ESTV para μ

Los resultados de ambos observadores, $\Omega 1$ y $\Omega 2$, se muestran en la figura (4.2). Sus valores de ganancias, la configuración de parámetros y las condiciones iniciales se muestran en la Tabla (4.2).

Observ.	Valores de parámetros	Condiciones Iniciales
$\Omega 1$	$p = 1/2, q = 1, l_1 = 2, l_2 = 1, m_1 = 0.2, m_2 = 1$	$\hat{X}(0) = 1.41, \hat{\varphi}(0) = 0.2115$
$\Omega 2$	$p = 1/2, q = 1, l_1 = 2, l_2 = 1, m_1 = 0.3, m_2 = 1$	$\hat{X}(0) = 1.41, \hat{\mu}(0) = 0.15$

Tabla 4.2: Ejemplo de motivación: parámetros y ganancias observadores $\Omega 1$ y $\Omega 2$

Los resultados de simulación muestran que aún en condiciones iniciales iguales, la diferencia en la convergencia es notoria durante el transitorio. Obsérvese que al inicio de la simulación, la velocidad de convergencia en el caso del ESTV es mayor tanto para la estimación de la biomasa X como para la estimación de la tasa de crecimiento μ , ver figura (4.2); esto es debido a que el fenómeno de pico en la estimación de X es de menor magnitud

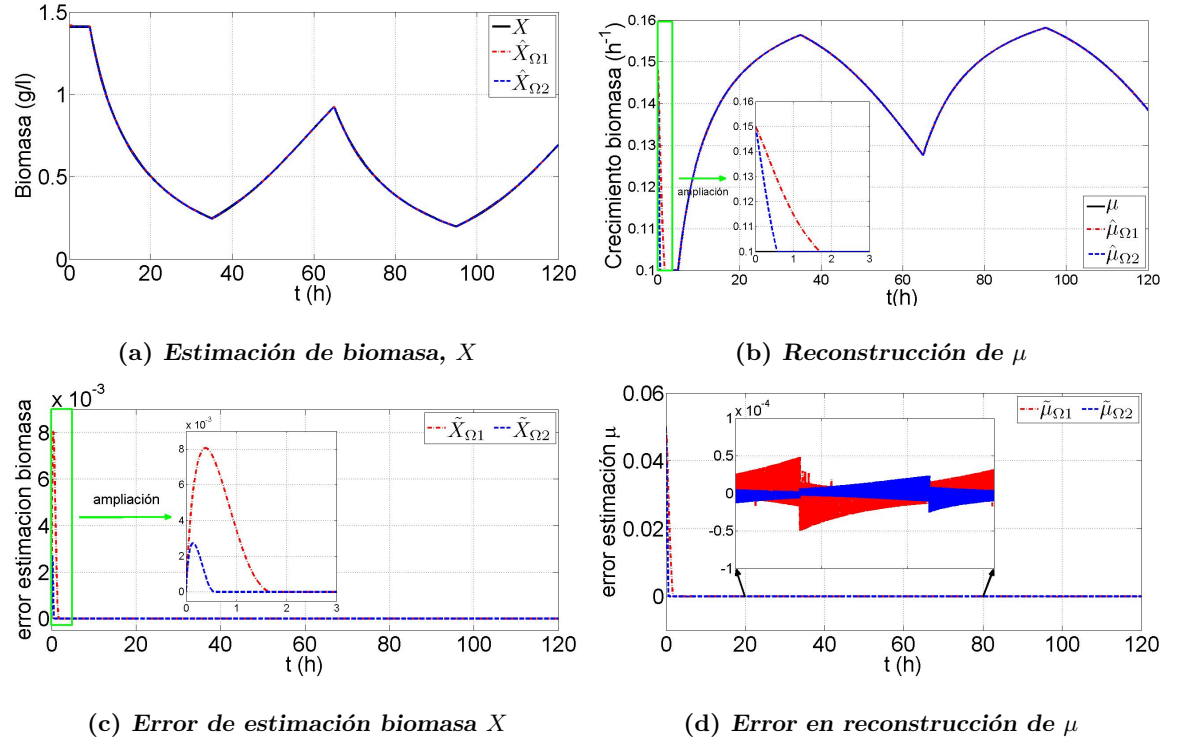


Figura 4.2: Estimación de X y μ con observadores propuestos: Ω_1 y Ω_2 , caso ideal

en el caso del ESTV, ver figura (4.2(c)). En este caso fue posible hacer que Ω_1 y Ω_2 tuvieran la misma magnitud de *chattering*, ver figura (4.2(d)), pero no siempre es posible.

4.1.2. Comparación: ESTV vs OAG

Bajo las mismas condiciones el OAG puede ser aplicado con el mismo objetivo para este ejemplo. De hecho es la fuente de donde se tomó este caso de estudio. Es por ello que aquí se reporta y se compara para efectos de la reconstrucción de la tasa de reacción específica.

El OAG propuesto en [Farza00] está dado por

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{X}} &= -2\theta(\tilde{X}) + \hat{\mu}\hat{X} - D\hat{X} \\ \dot{\hat{\mu}} &= -\frac{\theta^2}{\hat{X}}\tilde{X} \end{aligned} \right\} HGO \quad (4.10)$$

donde θ es la única ganancia a calibrar y en este caso los autores proponen $\theta = 3$.

Los resultados de las figuras (4.3(a),4.3(c)) muestran la comparación realizada con

el OAG en el caso ideal, en el que la ganancia a ajustar es solamente una. En el caso ideal, sin ruido en la medición, se debe notar las propiedades de convergencia del ESTV que reconstruye de forma exacta y en tiempo finito al parámetro μ y además que su velocidad de convergencia es mayor que en el OAG.

El tipo de convergencia del OAG es asintótica, y el error es acotado en una región inversamente proporcional al valor de la ganancia θ ; esta región puede ser disminuida arbitrariamente incrementando el valor de θ . Pero realizar esto significa incrementar el fenómeno de pico e incrementar la magnitud del ruido en la señal estimada, por lo que se debe establecer un compromiso entre velocidad de convergencia y rechazo a ruido.

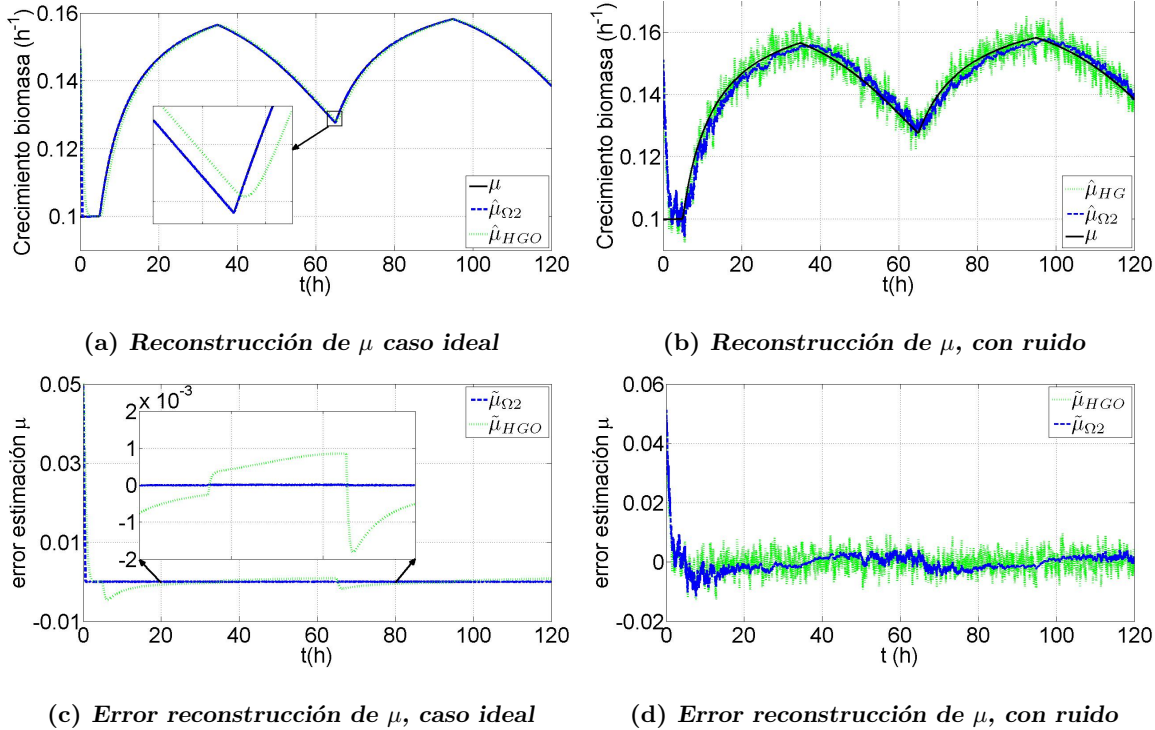


Figura 4.3: Resultados de estimación X y μ : ESTV y OAG con y sin ruido

En el caso del ESTV, también se debe tener en cuenta este compromiso. Sin embargo, la posibilidad de ponderar las dos clases de términos que contiene (de alto y bajo orden), hace que se puedan obtener mejores resultados. Como se puede ver, en el caso de ruido presente en la medición de X , es notorio el mejoramiento de rechazo a ruido en la reconstrucción de μ gracias a la disminución de la ganancia lineal, ver figuras (4.3(b),4.3(d)).

4.1.3. Estimación de estado no medido: substrato

El objetivo de esta sección es estimar el estado no medido S , en el modelo (4.1). Recordando que el modelo de la dinámica del substrato está dado por

$$\dot{S} = -k\mu X + D(S_{in} - S) \quad (4.11)$$

Una vez que se tiene un estimado de la tasa de reacción, o bien de la tasa de reacción específica; es posible incluir éste estimado como una cantidad conocida en el modelo. Siendo así, se puede utilizar la dinámica del estado no medido y de forma simple obtener un estimado. Para tal efecto considere

$$\dot{\hat{S}} = \dot{\hat{S}}_\mu = -k\hat{\mu}X + D(S_{in} - \hat{S}) \quad (4.12)$$

el error de estimación $\tilde{S} = \hat{S}_\mu - S$, tiene la siguiente dinámica

$$\dot{\tilde{S}} = -k\tilde{\mu} - D\tilde{S} \quad (4.13)$$

como se puede ver la velocidad de convergencia no es asignable; y es tal que depende de los parámetros k, D los cuales deben satisfacer la condición de excitación persistente, que en este caso se reduce a la positividad de ambos valores.

Con fines comparativos, la estimación de S mediante la ecuación (4.12) se compara con un observador asintótico (OA). El cual es capaz de dar una estimado de los estados, sin considerar el conocimiento de las tasas de reacción. El OA se puede construir definiendo la siguiente variable auxiliar

$$Z = kX + S \quad (4.14)$$

que es una combinación lineal del estado conocido X y el no conocido S . Siendo así, el OA para (4.1) está dado por

$$\begin{aligned} \dot{\hat{Z}} &= -D\hat{Z} + DS_{in} \\ \hat{S} &= \hat{S}_{AO} = \hat{Z} - kX \quad (\text{algebraico}) \end{aligned} \quad (4.15)$$

definiendo al error como $\tilde{Z} = \hat{Z} - Z$, por lo que su dinámica es

$$\dot{\tilde{Z}} = -D\tilde{Z} \quad (4.16)$$

Debe notarse que aplicando un OA, no se requiere ningún tipo de conocimiento de la tasa de reacción para el diseño del observador, pero esto tiene su costo.

Primero, no es posible obtener un estimado de las tasas de reacción. Segundo, la velocidad de convergencia no es asignable y es tal que depende de las condiciones experimentales del proceso; como se puede ver explícitamente en (4.16) en el que la velocidad de convergencia depende de la tasa de dilución D . Tercero, la relación mediante la cual se obtiene a \hat{S} es una relación algebraica; por lo que el rechazo a ruido es pobre cuando se tiene ruido presente en la medición de X .

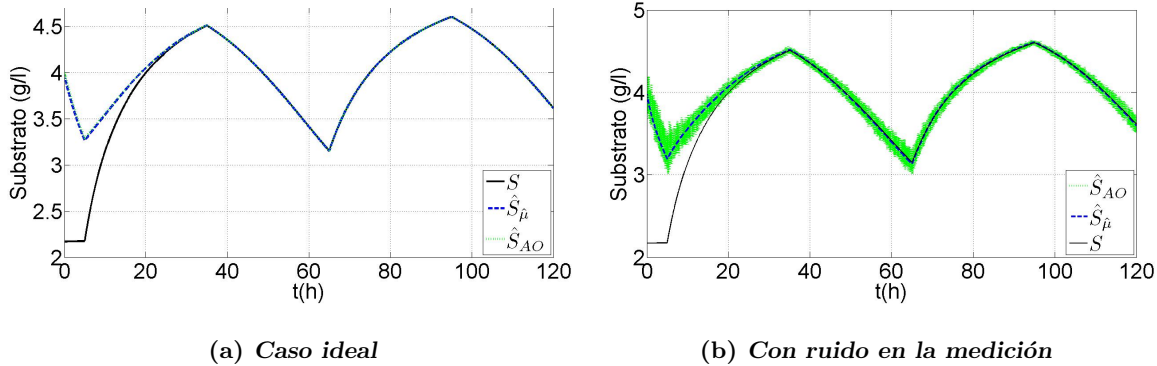


Figura 4.4: Resultados de estimación de S y comparación con un OA

Respecto al estimado obtenido mediante (4.12), de la gráfica (4.4(a)) se puede apreciar que la velocidad de convergencia no es mejorada puesto que el término adherido a la dinámica del error es despreciable. Es decir, analizando las ecuaciones de la dinámica del error (4.13), el término $k\tilde{\mu}$ es despreciable por:

- La estimación de μ con el ESTV se da en tiempo finito
- El término $k\tilde{\mu}$ en el transitorio es relativamente pequeño en magnitud

Con respecto al rechazo a ruido, se puede observar una mejora considerable; esto es debido a que se utiliza la dinámica de S para su estimación, ya que se considera a $\hat{\mu}$ como un parámetro conocido puesto que se provee mediante el observador Ω_2 . La mala respuesta de rechazo a ruido en el OA se debe a que el ruido presente en la medición del estado conocido X no es afectado de forma alguna en la relación algebraica (4.15), por lo que se

tiene presente directamente en la estimación de S .

4.2. Estimación de tasas de reacción para el modelo general de bioprocesos

En la sección anterior se mostró mediante un ejemplo simple la aplicación de un OSTG y un ESTV, para un proceso de crecimiento microbiano. En el que considera un solo tipo de microorganismos (biomasa), una sola reacción y un solo tipo de substrato. Sin embargo, en general, los modelos de diversos bioprocesos involucran a más de una especie de microorganismos, con varios tipos de reacciones tanto de crecimiento microbiano como bioquímicas. A su vez cada una de ellas es dependiente de varios tipos de substratos limitantes, pudiendo producirse en el reactor diferentes tipos de productos.

Es por ello que en este apartado se realiza la generalización de observadores OSTG aplicados a bioprocesos haciendo uso del modelo general dado en la sección 2.3 de este trabajo, mediante el cual se pueden incluir casos de una mayor complejidad en el esquema de observación aquí propuesto. Los propósitos de estimación, dadas las condiciones, tienen dos objetivos principales:

- Estimar todas y cada una de las tasas de reacción presentes en el modelo;
- Estimar los estados no medidos.

En el primer caso, se considera a la tasas de reacción como una entrada desconocida para el diseño del observador, aplicando varios OSTG en paralelo para la estimación de las tasas de reacción y una vez obtenidas estas, poder proveer a las dinámicas de los estados no medidos de la tasa de reacción estimada.

4.2.1. Estimar todas las tasas de reacción con OSTG

Para el caso en que se supone a las tasas de reacción φ como una cantidad desconocida en el modelo, es posible establecer las condiciones de cuándo es posible estimar todas las tasas de reacción y a su vez estimar todos los estados; tomando como referencia las condiciones de existencia de un Observador Asintótico.

El modelo general para bioprocesos [Bastin90, Dochain08], el cual se obtiene mediante un balance de masas y un esquema de reacciones, en forma vectorial está dado por:

$$\dot{\xi} = K\varphi(\xi, t) - D\xi - Q(\xi) + F \quad (4.17)$$

donde $\xi \in \mathbb{R}^n$ es el estado que representa la concentración de componentes, $K \in \mathbb{R}^{n \times r}$ es la matriz de coeficientes de producción, $\varphi \in \mathbb{R}^r$ es el vector de tasas reacción, D es la matriz de tasas de dilución, Q es el vector de tasas de salida gaseosas y F es el vector de tasas de alimentación. Nótese que ξ_i representa la i -ésima componente de $\xi \in \mathbb{R}^n$.

Realizando una partición del sistema en estados medibles ξ^a , y estados no medibles ξ^b

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi^a \\ \xi^b \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

con la correspondiente partición de las matrices y vectores, y considerando a las tasas de reacción φ como una cantidad desconocida en el modelo (4.17). Entonces es posible estimar todas las tasas de reacción y a su vez estimar todos los estados cuando las condiciones de existencia de un OA se satisfacen:

C1_{OA} K , Q , F y D son conocidos

C2_{OA} El número de variables de estado conocidas m es igual o mayor que el rango de de la matriz K , es decir

$$m = \dim(\xi^a) \geq r = \text{rank}(K) = \text{rank}(K^a)$$

C3_{OA} La matriz K^a es invertible

Reconstrucción de tasas de reacción

Tomando el modelo reducido de estados conocidos ξ^a , y definiendo

$$\chi = (K^a)^{-1}\xi^a \quad (4.19)$$

y tomando a las derivadas de las tasas de reacción como dinámicas extendidas, se tiene

$$\left. \begin{aligned} \dot{\chi} &= \varphi(t) - (K^a)^{-1}(D^a\xi^a + Q^a - F^a) \\ \dot{\varphi} &= \Delta \end{aligned} \right\} \Sigma_{\xi^a} \quad (4.20)$$

donde $\Delta = [\dot{\varphi}_1, \dots, \dot{\varphi}_r]^T$. El modelo (4.20) cumple las siguientes condiciones

- Grado relativo 1, de χ_i respecto a φ_i
- $|\dot{\varphi}_i| \leq \epsilon$, $\epsilon \doteq \text{constante}$

Por lo que es posible estimar a ξ^a y a φ en (4.20) con el siguiente observador

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{\chi}} &= -L_1\Phi_1(\tilde{\xi}^a) + \hat{\varphi} - (K^a)^{-1}(D^a\xi^a - Q^a + F^a) \\ \dot{\hat{\varphi}} &= -L_2\Phi_2(\tilde{\xi}^a) \end{aligned} \right\} \Omega_{\xi^a}$$

definiendo el error como $\tilde{\chi} = \hat{\chi} - \chi$ y $\tilde{\varphi} = \hat{\varphi} - \varphi$. Tal que las dinámicas del error de observación son

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\chi}} &= -L_1\Phi_1(\tilde{\xi}^a) + \tilde{\varphi} \\ \dot{\tilde{\varphi}} &= -L_2\Phi_2(\tilde{\xi}^a) + \Delta \end{aligned}$$

donde

$$L_1 = \text{diag}[l_{1,\xi_1^a}, \dots, l_{1,\xi_m^a}] \quad L_2 = \text{diag}[l_{2,\xi_1^a}, \dots, l_{2,\xi_m^a}]$$

y

$$\Phi_1(\tilde{\xi}^a) = \begin{bmatrix} \phi_1(\tilde{\xi}_1^a) \\ \vdots \\ \phi_1(\tilde{\xi}_m^a) \end{bmatrix}, \quad \Phi_2(\tilde{\xi}^a) = \begin{bmatrix} \phi_2(\tilde{\xi}_1^a) \\ \vdots \\ \phi_2(\tilde{\xi}_m^a) \end{bmatrix}$$

con $p \geq 1/2, q \geq 1, m_{1,\xi_i^a}, m_{2,\xi_i^a} > 0$, y cada función $\phi_1(\tilde{\xi}_i^a), \phi_2(\tilde{\xi}_i^a)$, para $i = [1, \dots, m]$ están dadas por

$$\phi_1(\tilde{\xi}_i^a) = m_{1,\xi_i^a} |\tilde{\xi}_i^a|^p \text{sign}(\tilde{\xi}_i^a) + m_{2,\xi_i^a} |\tilde{\xi}_i^a|^q \text{sign}(\tilde{\xi}_i^a)$$

$$\phi_2(\tilde{\xi}_i^a) = pm_{1,\xi_i^a}^2 |\tilde{\xi}_i^a|^{2p-1} \text{sign}(\tilde{\xi}_i^a) + m_{2,\xi_i^a}^2 q |\tilde{\xi}_i^a|^{2q-1} \text{sign}(\tilde{\xi}_i^a) + (p+q)m_{1,\xi_i^a} m_{2,\xi_i^a} |\tilde{\xi}_i^a|^{p+q-1} \text{sign}(\tilde{\xi}_i^a)$$

Para obtener un estimado de los estados medibles ξ^a , basta con realizar

$$\hat{\xi}^a = K^a \hat{\chi}$$

Es decir, en la dinámica del error se tiene al Algoritmo Genérico de Segundo Orden (AGSO) para cada término. La razón de construir varios observadores para estimar cada tasa de reacción, es por el hecho de que frecuentemente las derivadas de las tasas de reacción

a estimar no están en valores cercanos entre sí. Si no es el caso se puede realizar la la calibración con un sólo juego de parámetros y ganancias como lo propuesto en [Farza98].

NOTA: En el caso en el que la matriz K^a resulte no ser una matriz cuadrada, es decir en el caso en el que el número de tasas de reacción desconocidas sea menor que el número de concentraciones medidas (redundancia), se puede llevar al caso cuadrado. La elección sobre qué variable medida elegir se puede basar en la confiabilidad de las mediciones (tiempo de respuesta, varianza de datos, relación señal-ruido, etc); en el caso de que se quiera usar la redundancia, se pueden combinar los resultados de las tasas de reacción.

Caso particular del OSTG: Observador de alta ganancia

Mediante la configuración adecuada de las ganancias l_1, l_2 y los parámetros en (3.3), es posible derivar como un caso particular la aproximación originalmente dada en [Farza98, Farza00] con observadores de alta ganancia. En esta aproximación se tiene un único término a calibrar, sea cual sea el número de tasas de reacción a estimar. De forma explícita, se tiene que si en Ω_{ξ^a} se hacen:

- Las ganancias $l_{1,\xi_i^a} = 2$, $l_{1,\xi_i^a} = 1$
- Los parámetros $m_{1,\xi_i^a} = 0$
- Los parámetros $q = 1$ y $m_{2,\xi_i^a} = \theta$

entonces el observador Ω_{ξ^a} , toma la siguiente forma

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{y}} &= -2\theta(\tilde{\xi}^a) + \hat{\varphi} - (K^a)^{-1}(D^a\xi^a - Q^a + F^a) \\ \dot{\hat{\varphi}} &= -\theta^2(\tilde{\xi}^a) \end{aligned} \right\} \Omega_{HGO}$$

Como se puede ver en la aproximación de alta ganancia, se tiene un único término a calibrar en el observador, no importando el número de tasas de reacción a estimar. Pero, generalmente, las derivadas de las tasas de reacción no están en valores cercanos entre sí, por lo que es mejor tener para cada tasa de reacción a estimar un observador, como en el caso de Ω_{ξ^a} .

4.2.2. Estimación de estados no medidos

En esta sección se muestra cómo estimar los estados no medidos sin utilizar un observador asintótico. Lo que se propone es estimar los estados no medidos utilizando los estimados de las tasas de reacción. Para hacer notar la diferencia, primero se reporta el OA. Después lo que se propone en este trabajo, que es estimar los estados no medidos utilizando los estimados de las tasas de reacción. Finalmente se hacen algunos comentarios sobre ambas formas de obtener los estimados.

Observador asintótico

Una de las formas más conocidas para estimar los estados no medibles en un bioproceso, cuando se suponen desconocidas las tasas de reacción, es utilizar un observador asintótico (OA), que pertenece a la clase de observadores con entradas desconocidas. Considerando que las condiciones (C1_{OA}, C2_{OA}, C3_{OA}) se cumplen, entonces es posible obtener un estimado de los estados no medibles del proceso ξ^b mediante un OA.

El modelo general de bioprocesos queda reescrito como

$$\begin{aligned}\dot{\xi}^a &= K^a \varphi(\xi^a, \varphi^b) - D\xi^a - Q^a - F^a \\ \dot{\xi}^b &= K^b \varphi(\xi^a, \varphi^b) - D\xi^b - Q^b - F^b\end{aligned}$$

Se define una combinación lineal de la partición del estado $\xi = [\xi^a, \xi^b]$, por medio de

$$Z = \xi^b - K^b(K^a)^{-1}\xi^a$$

donde ξ^a es medible y $(K^a)^{-1}$ es la inversa de la matriz de coeficientes K^a ; por lo que la dinámica de Z queda definida como

$$\dot{Z} = -DZ - Q^b + F^b - K^b(K^a)^{-1}[-Q^a + F^a]$$

Se considera entonces el siguiente OA

$$\begin{aligned}\dot{\hat{Z}} &= -D\hat{Z} - Q^b + F^b - K^b(K^a)^{-1}[-Q^a + F^a] \\ \hat{\xi}^b &= \hat{Z} + K^b(K^a)^{-1}\xi^a\end{aligned}\tag{4.21}$$

donde $\hat{\xi}^b$ es el vector de los estimados de las variables no-medibles, y es resultado de una relación algebraica. Para analizar la convergencia del OA, se define la dinámica del error como $\tilde{Z} = \hat{Z} - Z$, tal que su dinámica está dada por

$$\dot{\tilde{Z}} = -D\tilde{Z}$$

donde la condición de convergencia está dada por la tasa de dilución D , la cual tiene que cumplir con la condición de excitación persistente. En el caso en el que D es escalar entonces (un sólo reactor) entonces se reduce a

$$D > 0$$

Recordemos que la tasa de dilución está definida como

$$D = \frac{Q_{in}}{V}$$

donde Q_{in} es el flujo de entrada al reactor y V es el volumen del medio líquido en el reactor. Así que si el reactor funciona en modo lote, es decir $q = 0$; entonces se pierde la propiedad de convergencia en el OA. Es por ello que se dice que las condiciones de convergencia de un OA están dadas por las condiciones experimentales del proceso.

Estimación de estados no medidos utilizando tasas de reacción estimadas

Diferente a la sección anterior, aquí se propone una forma diferente de estimar los estados no medibles en un bioproceso, sin la necesidad de utilizar un OA.

Una vez que se obtienen los estimados de las tasas de reacción (mediante Ω_{ξ^a} , dado en la sección anterior), es natural utilizarlos para estimar los estados no medibles del sistema ξ^b , para lo cual se toma la parte del modelo de estados no medibles que está dada por

$$\dot{\xi}^b = K^b \varphi - D^b \xi^b - Q^b + F^b$$

y se propone el siguiente observador

$$\dot{\hat{\xi}}^b = K^b \hat{\varphi} - D^b \hat{\xi}^b - Q^b + F^b \quad (4.22)$$

definiendo al error como $\tilde{\xi}^b = \hat{\xi}^b - \xi^b$, tal que su dinámica está dada por

$$\dot{\tilde{\xi}}^b = K^b \tilde{\varphi} - D^b \tilde{\xi}^b \quad (4.23)$$

donde la convergencia está condicionada por los valores de K^b, D^b .

Como se puede observar, y a diferencia del observador asintótico, se utilizan las dinámicas de los estados no medibles para obtener su estimado (4.22), lo que hace que cuando se tiene ruido en las mediciones de ξ^a , y por las propiedades del modelo, se tenga una mejor propiedad de rechazo a ruido.

Con respecto a la velocidad de convergencia, en la ecuación de error (4.23) se tiene el término adicional $K^b \tilde{\varphi}$, en comparación con el OA que sólo tiene a la tasa de dilución. Este término no mejora la velocidad de convergencia, puesto que la estimación de las tasas de reacción se da de forma “rápida” y el término se hace cero.

Nota: Sobre la estimación de estados no medidos

Tanto el OA (4.21) como el observador (4.22) aquí propuesto, funcionan en lazo abierto; de hecho la calidad de las estimaciones recae sobre los balances de masa y no son corregidos por una discrepancia entre las cantidades medidas y las estimadas.

Se asume que el balance de masas es ideal, y en el caso de (4.22) que la estimación de la tasa de reacción es ideal; sin embargo los coeficientes (parámetros) de producción son difíciles de estimar correctamente, y en algunos casos (como en el caso de tratamiento de aguas residuales) las entradas de masa en el sistema no son bien conocidas. En estos casos puede ser inconveniente basar el observador sólo en el modelo de balance de masas sin tener en cuenta alguna de las medidas del sistema que reflejan su estado real.

4.2.3. Estimar tasas de reacción específicas con ESTV

Para el caso en el que se supone un conocimiento mínimo de la tasa de reacción, es posible estimar un parámetro asociado a ésta mediante el uso de un ESTV reportado en la sección 3.4 de este trabajo.

La estimación de las tasas de reacción y los estados no medidos se realiza con base en un conocimiento mínimo de las tasas de reacción presentes en el modelo; este

conocimiento mínimo se puede formalizar como [Bastin90]: las tasas de reacción $\varphi_j(\xi)$, ($j = 1, \dots, r$) serán representadas por

$$\varphi_j(\xi) = h_i(\xi)\rho_j(\xi) \quad (4.24)$$

donde $h_j(\xi)$ es una función conocida dependiente del estado ξ , mientras que $\rho_j(\xi)$ es lo que se denomina “*tasa de reacción específica*” dado que es la tasa de reacción por unidad de cada reactante [Farza98], y es una función desconocida y variante en el tiempo. Para simplificar la exposición, sólo se considera el caso escalar.

Considerando que del modelo general de bioprocesos (4.17) se tiene un estado (concentración) conocido (ξ_i), y que la tasa de reacción tiene una estructura como en (4.24), entonces la dinámica de la concentración puede ser reescrita como

$$\dot{\xi}_i = h_i(\xi)\rho_j(\xi) - D\xi_i - Q_i + F_i$$

donde $h_i(\xi)$ es una función conocida de signo definido y variante en el tiempo, el parámetro variante en el tiempo ρ_j es considerado como desconocido, y su derivada está dada por $\dot{\rho}_j = \delta_{\rho_j}$ y es acotada. Entonces el objetivo es estimar ρ_j con el siguiente ESTV

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\xi}}_i &= -l_1\phi_1(\tilde{\xi}_i) + h_i(\xi)\hat{\rho}_j(\xi) - D\hat{\xi}_i - Q_i + F_i \\ \dot{\hat{\rho}}_j &= -l_2\phi_2(\tilde{\xi}_i)h_i(\xi) \end{aligned} \quad (4.25)$$

donde ϕ_1, ϕ_2 están definidas como en (3.3) y l_1, l_2 son ganancias a calibrar en el ESTV. Definiendo al error como $\tilde{\xi}_i = \hat{\xi}_i - \xi_i$ y $\tilde{\rho}_j = \hat{\rho}_j - \rho_j$, la dinámica del error está dada por

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\xi}}_i &= -l_1\phi_1(\tilde{\xi}_i) - D\tilde{\xi}_i + h_i(\xi)\tilde{\rho}_j(\xi) \\ \dot{\tilde{\rho}}_j &= -l_2\phi_2(\tilde{\xi}_i)h_i(\xi) + \delta_{\rho_j} \end{aligned}$$

por lo que configurando adecuadamente las ganancias y parámetros en (4.25), se estima al parámetro ρ_j de forma exacta y en tiempo finito.

El ESTV permite obtener un estimado directo de la tasa de reacción específica ρ_j , sin necesidad de realizar la operación algebraica que sería necesaria si se utilizará un OSTG, en la que es necesario dividir por lo que aquí se considera como regresor; evitando una posible singularidad en la estimación del parámetro. Además, mediante esta aproximación

es posible tener un mejor ajuste de ganancias para estimar al parámetro, como ya se ha mencionado antes.

En el caso en que la función conocida $h_i(\xi)$ se haga cero por un periodo largo de tiempo, entonces la observabilidad en (4.25) se pierde; pero este hecho representaría en la práctica una condición atípica por lo que podría tomarse como un indicador del estado del proceso.

Capítulo 5

Casos de estudio

En este capítulo se reportan tres casos de estudio tomados de la literatura que muestran las posibilidades de estimación mediante OSTG y ESTV con una mayor complejidad. El primer caso de estudio corresponde a un proceso de digestión anaerobia, en el cual se muestra cómo reconstruir todas las tasas de reacción, así como la estimación de las variables de estado no medidas; para realizarlo se plantea libremente las variables de estado conocidas en el modelo. El segundo caso de estudio es un modelo de producción de lipasa, mediante el cual se muestra la posibilidad de aplicar el mismo esquema de observación planteado con OAG que ya ha sido reportado con anterioridad.

Finalmente, en el tercer caso de estudio se trata un modelo de crecimiento de fitoplanctón marino útil para la producción de biodiesel, en el cual se pueden encontrar las diferentes variaciones de estimación propuestas en este trabajo. Además de lo anterior se muestra cómo la obtención de un estimado para la tasa de reacción mejora notablemente la velocidad de convergencia en la estimación del estado no medido, una vez que se le provee de ésta.

A lo largo del desarrollo de los diferentes ejemplos, se enfatizan y resaltan las propiedades de los observadores aquí propuestos mediante los resultados de simulación; y en algunos casos éstos se comparan con la aproximación con OAG para el caso de la estimación de la tasa de reacción y/o con el OA para el caso de la estimación de estados no medidos.

5.1. Ejemplo 1: Proceso de digestión anaerobia (PDA)

Este caso de estudio trata de un modelo de proceso de digestión anaerobia (PDA) [Bastin90], el cual tiene cuatro variables de estado, y dos reacciones. El modelo es ampliamente citado en la literatura con algunas variaciones sobre lo que se supone como medible en el modelo. Aquí se hace una elección libre de las variables de estado que se suponen conocidas con el fin de mostrar el caso donde se estiman todas y cada una de las tasas de reacción y todos los estados no conocidos. Considerando el modelo de PDA, descrito por el sistema de ecuaciones

$$\begin{bmatrix} \dot{S}_1 \\ \dot{X}_1 \\ \dot{S}_2 \\ \dot{X}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k_1 & 0 \\ 1 & 0 \\ k_3 & -k_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} - D \begin{bmatrix} S_1 \\ X_1 \\ S_2 \\ X_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} DS_{in} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.1)$$

donde las tasas de reacción

$$\varphi_1 = \frac{\mu_1 \mu_2}{(k_{S1} + S_1)(k_{S2} + S_2)} X_1 S_1, \quad \varphi_2 = \frac{\mu_3}{k_{S3} + S_2} X_2 S_2 \quad (5.2)$$

se consideran como cantidades desconocidas en el modelo, y bajo la suposición de que los estados medibles son X_1, S_2 el modelo (5.1) cumple las siguientes condiciones

- $\varphi = [\varphi_1, \varphi_2]^T$ son desconocidas;
- La matriz de coeficientes de producción (K) es conocida;
- El número de variables de estado conocidas, es igual o mayor que el rango de la matriz K (es decir, que el número de entradas desconocidas);
- La matriz de coeficientes de producción de la parte conocida del modelo es de rango completo e invertible por la izquierda (K^a);
- Las derivadas de las tasas de reacción son acotadas (acorde a la práctica).

Entonces es posible estimar todas y cada una de las tasa de reacción y los estados no medidos.

5.1.1. Obtención de todas las tasas de reacción en PDA con OSTG

Realizando la partición del sistema (5.1) en estados medibles y no medibles, y tomando sólo la parte de estados medibles

$$\begin{bmatrix} \dot{X}_1 \\ \dot{S}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ k_3 & -k_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} - D \begin{bmatrix} X_1 \\ S_2 \end{bmatrix} \quad (5.3)$$

se define a χ como

$$\begin{bmatrix} \dot{\chi}_1 \\ \dot{\chi}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \frac{k_3}{k_2} & -\frac{1}{k_2} \end{bmatrix} D \begin{bmatrix} X_1 \\ S_2 \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

Para que en el subsistema (5.4) se reconstruyan las tasas de reacción, considere el siguiente OSTG

$$\left. \begin{aligned} \dot{\chi}_1 &= -l_{1,X_1} \phi_{1,X_1}(\tilde{X}_1) + \hat{\varphi}_1 - DX_1 \\ \dot{\hat{\varphi}}_1 &= -l_{2,X_1} \phi_{2,X_1}(\tilde{X}_1) \\ \dot{\chi}_2 &= -l_{1,S_2} \phi_{1,S_2}(\tilde{S}_2) + \hat{\varphi}_2 - D\left(\frac{k_3}{k_2} X_1 - \frac{1}{k_2} S_2\right) \\ \dot{\hat{\varphi}}_2 &= -l_{2,S_2} \phi_{2,S_2}(\tilde{S}_2) \end{aligned} \right\} \Omega^a \quad (5.5)$$

donde la definición de error es $\tilde{X}_1 = \hat{X}_1 - X_1$ y $\tilde{S}_2 = \hat{S}_2 - S_2$, y los términos de corrección ϕ_1 y ϕ_2 están definidos como los términos del AGSO. Para obtener un estimado de los estados medidos basta con realizar

$$\begin{bmatrix} \dot{\hat{X}}_1 \\ \dot{\hat{S}}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ k_3 & -k_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\chi}_1 \\ \hat{\chi}_2 \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

Hasta aquí se tiene un estimado de los estados medidos, y un estimado de cada término de reacción presente en el modelo. Los estimados de las tasas de reacción serán utilizados en la siguiente sección para estimar los estados no medidos.

5.1.2. Estimación de los estados no medidos

Una vez que se tiene un estimado de las tasas de reacción, de la sección anterior, se pueden estimar los estados no medidos incluyendo a los estimados de tasas de reacción como una cantidad conocida en el modelo. Para el subsistema de estados desconocidos

$$\begin{bmatrix} \dot{S}_1 \\ \dot{X}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k_1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} - D \begin{bmatrix} S_1 \\ X_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} DS_{in} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.7)$$

C. I. (g/l)	Modelo	Observadores	
	Parámetros	C. I. $\Omega_{1,2}$	Parámetros
$S_1(0) = 8$	$k_{1,2,3} = 0.9, 0.5, 5$	$\hat{S}_1(0) = 10$	$l_{1,X_1} = 2, l_{2,X_1} = 1$
$X_1(0) = 1.7$	$\mu_{1,2,3} = 6, 8, 3$	$\hat{X}_1(0) = 1.7, \varphi_1(0) = 2$	$m_{1,2} = 2, 3$
$S_2(0) = 4$	$k_{S_1,S_2,S_3} = 10, 6, 1$	$\hat{S}_2(0) = 4, \nu(0) = 2$	$l_{1,S_2} = 2, l_{2,S_2} = 1$
$X_2(0) = 0.6$	$D = 2(\text{g/l})$	$\hat{X}_2(0) = 1$	$m_{1,2} = 3, 5$

Tabla 5.1: Condiciones iniciales y valores de parámetros en simulación PDA

considere el siguiente observador

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{S}}_1 &= -k_1 \hat{\varphi}_1 - D\hat{S}_1 + DS_{in} \\ \dot{\hat{X}}_2 &= \hat{\varphi}_2 - D\hat{X}_2 \end{aligned} \right\} \Omega^b \quad (5.8)$$

definiendo al error $\tilde{S}_1 = \hat{S}_1 - S_1, \tilde{X}_2 = \hat{X}_2 - X_2$; tal que la dinámica del error para Ω^b está dada por

$$\left. \begin{aligned} \dot{\tilde{S}}_1 &= -k_1 \tilde{\varphi}_1 - D\tilde{S}_1 \\ \dot{\tilde{X}}_2 &= \tilde{\varphi}_2 - D\tilde{X}_2 \end{aligned} \right\} \quad (5.9)$$

donde las velocidades de convergencia no son asignables, y son tal que dependen de las condiciones experimentales del proceso, que en este caso resulta ser la tasa de dilución.

5.1.3. Simulación y resultados del ejemplo de PDA

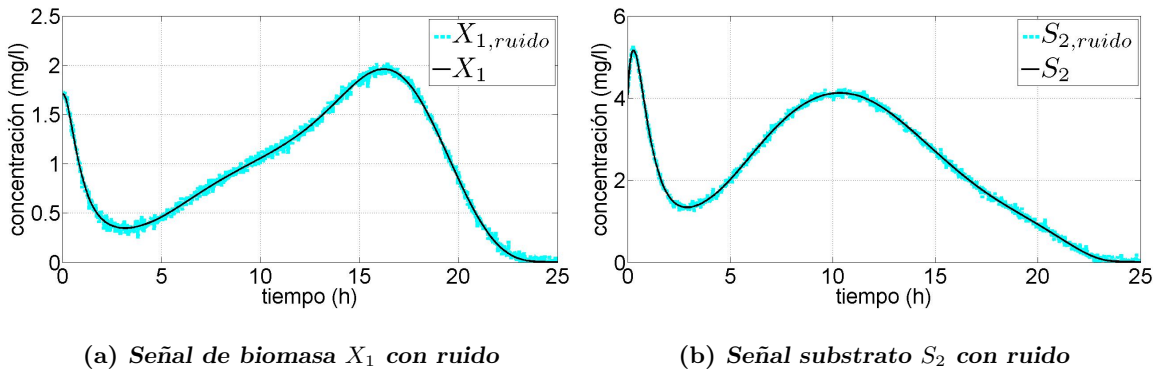


Figura 5.1: Condiciones de modelo en el caso de mediciones con ruido

Los resultados de simulación que se muestran a continuación se realizan considerando que las tasas de reacción en el sistema están definidas como en (5.2), los valores de

sus parámetros así como las condiciones iniciales del modelo y los valores de los coeficientes de producción se muestran en la Tabla (5.1).

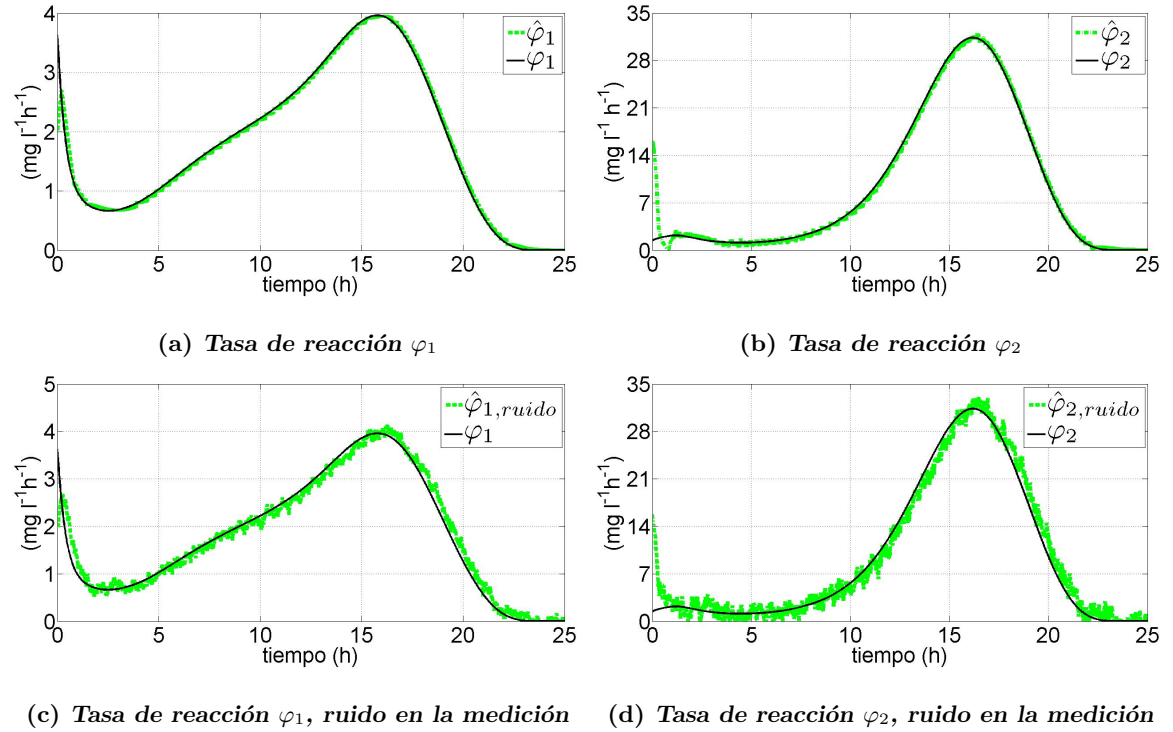


Figura 5.2: Resultados de estimación $\hat{\varphi}_{1,2}$ ideal y con ruido en las mediciones

En el caso en que se considera mediciones con ruido, el ruido con el que se corrompen las señales es ruido blanco gaussiano de tipo aditivo con una magnitud de 6% para el caso de las mediciones tanto de la biomasa X_1 como del substrato S_2 , como se muestra en las figuras (5.1(a),5.1(b)). Adicionalmente, se consideró un paso de solución de 1 minuto con el método de solución tipo “Euler” de MATLAB.

El propósito de tener un paso relativamente grande en la solución es para mostrar cómo los observadores basados en modos deslizantes, y en concreto los utilizados en este trabajo, dependen en gran medida del tiempo en que se considera que llega un nuevo dato de medición para la corrección de la estimación. Esto se traduce en la magnitud del efecto de *chattering* y se puede ver en las figuras (5.2(a),5.2(b)), en las cuales no se considera ruido pero a pesar de ello la estimación de las tasas de reacción, aunque son satisfactorias, tienen presente de forma significativa el efecto de *chattering*.

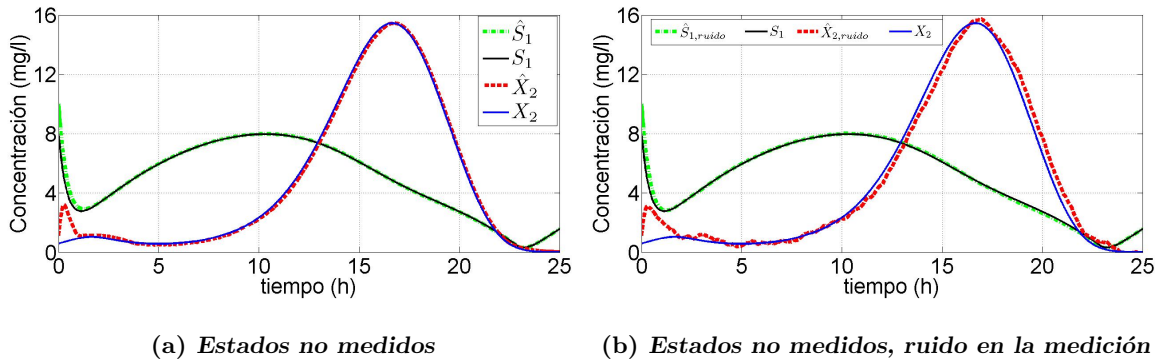


Figura 5.3: Resultados de estimación \hat{X}_2, \hat{S}_1 ideal y con ruido

Para el caso en el que se supone ruido en las mediciones, es importante notar que a pesar de tener el efecto de *chattering* con magnitud significativa en el caso ideal de la reconstrucción de las tasas de reacción, el ajuste de ganancias en el estimador (5.5) permite conservar un buen compromiso entre la velocidad de convergencia y el rechazo a ruido.

Por otra parte, la estimación de los estados no medidos (Figuras (5.3(a),5.3(a))) nos deja ver cómo el hecho de utilizar las dinámicas de S_1, X_2 permite obtener una estimación con poco ruido. A su vez, se puede notar como el efecto del ruido en la reconstrucción de las tasas de reacción se traduce mayormente en un efecto de sesgo en la estimación de los estados no medidos. En estas mismas figuras, se puede notar el efecto de pico en la estimación de las tasas de reacción puede traducirse en un efecto negativo en la estimación de los estados no medidos.

La elección de las mediciones en este caso, aunque no son acordes a la práctica, tiene el propósito de mostrar como el esquema de observación aquí propuesto puede ofrecer resultados satisfactorios para reconstruir todas y cada una de las tasas de reacción y todos y cada uno de los estados no medidos en el modelo dadas las condiciones.

5.2. Ejemplo 2: Producción de lipasa (PL)

Como ya se ha mencionado, la principal aproximación dada con anterioridad a este trabajo para reconstruir las tasas de reacción cuando éstas se consideran como una entrada desconocida para efectos de diseño del observador, son las propuestas en [Farza98, Farza00].

En ese trabajo los autores proponen el uso de observadores de alta ganancia para realizar la tarea de reconstruir las tasas de reacción en bioprocesos. Los autores enfatizan el hecho de la simplicidad del tipo de observador propuesto, puesto que sólo se tiene que ajustar un sólo parámetro no importando el número de tasas de reacción a estimar.

Por otra parte, se ha argumentado en este trabajo que los observadores basados en el AGSO respecto a aquellos basados en el STA-clásico, permiten mejorar el efecto de chattering y la velocidad de convergencia debido a la presencia de términos de alto y bajo orden, mediante el ajuste respectivo de las parámetros y ganancias en el AGSO.

Es por ello que a continuación se presenta un caso de estudio donde se utilizan observadores OAG, observadores basados en el STA-clásico y observadores OSTG para reconstruir varias tasas de reacción en un proceso de producción de lipasa. Los resultados comparan a los tres tipos de observadores bajo las mismas condiciones de simulación y muestran que es posible obtener mejores estimados de las tasas de reacción mediante el uso del OSTG.

5.2.1. Modelo de producción de lipasa

La lipasa es una enzima que es capaz de catalizar una variedad muy amplia de substratos (aceites naturales, triglicéridos sintéticos, ácidos grasos, etc.) por lo que es utilizada y producida en diversos procesos industriales. El proceso de producción de lipasa involucra fases simultáneas del medio de cultivo y varias cinéticas de reacción altamente no lineales que contienen parámetros difíciles de identificar. Un modelo para representar la producción de esta enzima es reportado en [Selisteanu09], y es el siguiente

$$\Sigma_L \left\{ \begin{array}{l} \dot{S}_1 = -\eta(S_1)X + f \\ \dot{S}_2 = \eta(S_1) - \mu(S_2)(Y + S_2) \\ \dot{X} = \mu(S_2)X \\ \dot{L}_{in} = \nu_p(S_1, X, \mu) - \nu_{ex}(L_{in}) - \mu(S_2)L_{in} \\ \dot{L}_{ex} = \nu_{ex}(L_{in})X \\ Cer = (a\mu(S_2) + b)X \end{array} \right. \quad (5.10)$$

donde $S_1(g/l)$ concentración de substrato externo (ácido oleico), $S_2(g/g)$ es el substrato interno, $X(g/l)$ es la concentración de biomasa en el reactor, $L_{in}(u/mg)$ es la lipasa interna,

$L_{ex}(u/ml)$ es la lipasa externa; C_{er} es la tasa de excreción de dióxido de carbono (con a, b como sus parámetros), F es la tasa de alimentación de sustrato, Y es un coeficiente de producción, η es la tasa de absorción de S_1 , μ es la tasa de crecimiento específico de biomasa, ν_p es la tasa de producción de lipasa interna y ν_{ex} es la tasa de excreción de lipasa externa; las cuales para fines de simulación son:

$$\eta(S_1) = \frac{\eta^* S_1}{K_{M1} + S_1} \quad \mu(S_2) = \frac{\mu^* S_2}{K_{M2} + S_2} \quad (5.11)$$

$$\nu_p(S_1, S_2) = \frac{\nu_p^* [S_1/X]}{K_p + [S_1/X] + K_i [S_1/X]^2} \mu(S_2) \quad \nu_{ex}(L_{in}) = \frac{\nu_{ex}^* L_{in}}{K_{ex} + L_{in}}$$

Se considera que en el proceso de producción de lipasa los estados medibles son: sustrato externo S_1 , biomasa X , y lipasa externa L_{ex} . Para simplificar la notación, en este ejemplo se utilizará la notación dada en la sección 4.2.

Haciendo la partición del sistema (5.10) en estados medibles y no medibles, y considerando solamente el subsistema de variables de estado medidas

$$\left. \begin{array}{l} \dot{S}_1 = -\eta(S_1)X + f \\ \dot{X} = \mu(S_2)X \\ \dot{L}_{ex} = \nu_{ex}(L_{in})X \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \dot{\xi}_1 = -\varphi_1 + f \\ \dot{\xi}_2 = \varphi_2 \\ \dot{\xi}_3 = \varphi_3 \end{array} \right. \quad (5.12)$$

donde $\xi^a = [\xi_1, \xi_2, \xi_3]$ representan los estados medibles, y $F^a = [f, 0, 0]^T$ es conocido, y la matriz $K^a = \text{diag}[-1 \ 1 \ 1]$. Los componentes del vector de tasas de reacción $\varphi = [\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3]^T$ están dados por

$$\varphi_1 = \eta(S_1)\xi_1, \quad \varphi_2 = \mu(S_2)\xi_1, \quad \varphi_3 = \nu_{ex}(L_{in})\xi_1 \quad (5.13)$$

El objetivo es reconstruir las tasas de reacción φ_i , $i = 1, 2, 3$; considerándolas como una cantidad desconocida en el subsistema 5.12; el cual cumple con las condiciones siguientes condiciones

- Grado relativo 1, de ξ_i^a respecto a φ_i
- $|\dot{\varphi}_i| \leq \epsilon$, $\epsilon \doteq \text{constante}$

por lo que se pueden estimar las tasas de reacción φ_i .

Debe notarse que se trabaja sobre el modelo reducido (5.12) y que los estados no medidos en el sistema (5.10) no son tomados en cuenta para su estimación en este ejemplo.

Condiciones Iniciales	Valores de parámetros	
$S_1(0) = 4[g/l]$	$\eta^* = 0.21[h^{-1}]$	$K_{M1} = 0.11[g/l] \quad \mu^* = 0.25[h^{-1}]$
$S_2(0) = 0[g/l]$	$K_{M2} = 0.25[g/l]$	$\nu_p^* = 123[u/mg] \quad b = 216 \times 10^{-6}[mol/g]h^{-1}$
$X(0) = 0.5[g/l]$	$a = 0.0185[mol/g]$	$K_p = 0.26[g/g] \quad K_i = 22.2[g/g]$
$L_{in,ex}(0) = 0[u/ml]$	$\nu_{ex}^* = 4.09[h^{-1}]$	$K_{ex} = 19.5[u/mg] \quad Y = 1.16[g/g]$

Tabla 5.2: Condiciones iniciales valores de parámetros en modelo de PL

Condiciones de simulación

Los condiciones iniciales del modelo así como los valores de los parámetros de las funciones (5.11), se muestran en la tabla (5.2). En el caso en que se considera mediciones con ruido, el ruido con el que se corrompen las señales es ruido blanco gaussiano de tipo aditivo con una magnitud de aproximadamente el 5% para el caso de las mediciones tanto del sustrato S_1 como de la biomasa X_1 , como se muestra en las figura (5.4(a)) y de aproximadamente 3% del valor máximo para L_{ex} como se muestra en la figura (5.4(b)). Para todos los resultados obtenidos, se consideró un paso de solución de 10 (s) con el método de solución tipo “Euler” de MATLAB.

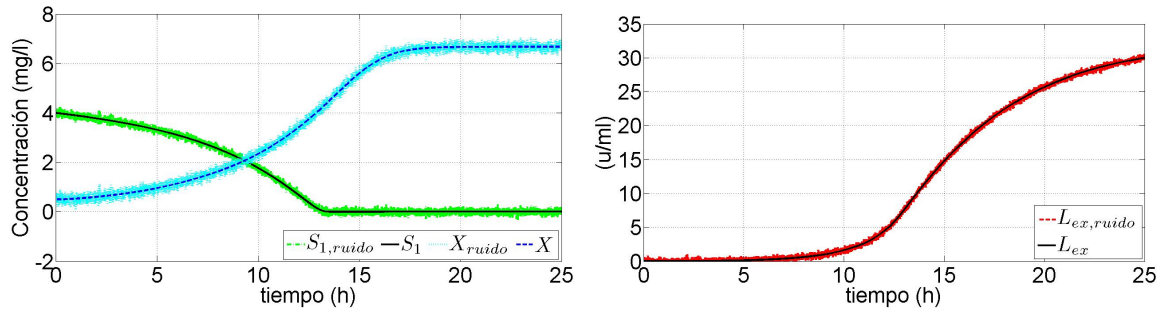
(a) Señal de Substrato S_1 y biomasa X con ruido(b) Señal Lipasa externa L_{ex} con ruido

Figura 5.4: Condiciones de modelo para efectos de simulación

5.2.2. Aplicación de OSTG para estimar tasas de reacción en PL

Retomando, el objetivo es reconstruir las tasas de reacción presentes en (5.12), el cual está dado en forma compacta por

$$\dot{\xi}^a = \varphi + F^a$$

definiendo $\chi = (K^a)^{-1}\xi^a$ se tiene que

$$\left. \begin{aligned} \dot{\chi} &= \varphi + (K^a)^{-1}F^a \\ \dot{\varphi} &= \Delta_L \end{aligned} \right\} \Sigma_{\xi^a}$$

para lo cual se propone el siguiente OSTG

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{\chi}} &= -L_1\Phi_1(\tilde{\xi}^a) + \varphi + (K^a)^{-1}F^a \\ \dot{\hat{\varphi}} &= -L_2\Phi_2(\tilde{\xi}^a) \end{aligned} \right\} \Omega_{\xi^a}$$

donde el error es definido como $\tilde{\xi}^a = \hat{\xi}^a - \xi^a$ y $\tilde{\varphi} = \hat{\varphi} - \varphi$, y las matrices diagonales L_1 , L_2 corresponden a las ganancias a ajustar para la corrección del estimador, los vectores $\Phi_1(\tilde{\xi}^a)$, $\Phi_2(\tilde{\xi}^a)$ contienen las funciones no lineales del algoritmo AGSO (ver 4.2), los cuales están dados explícitamente por

$$L_1 = \begin{bmatrix} l_{1,\xi_1} & 0 & 0 \\ 0 & l_{1,\xi_2} & 0 \\ 0 & 0 & l_{1,\xi_3} \end{bmatrix}, \quad L_2 = \begin{bmatrix} l_{2,\xi_1} & 0 & 0 \\ 0 & l_{2,\xi_2} & 0 \\ 0 & 0 & l_{2,\xi_3} \end{bmatrix},$$

$$\Phi_1(\tilde{\xi}^a) = \begin{bmatrix} \phi_1(\tilde{\xi}_1) \\ \phi_1(\tilde{\xi}_2) \\ \phi_1(\tilde{\xi}_3) \end{bmatrix}, \quad \Phi_2(\tilde{\xi}^a) = \begin{bmatrix} \phi_2(\tilde{\xi}_1) \\ \phi_2(\tilde{\xi}_2) \\ \phi_2(\tilde{\xi}_3) \end{bmatrix}$$

cada función $\phi_1(\tilde{\xi}_i)$, $\phi_2(\tilde{\xi}_i)$, para $i = \{1, 2, 3\}$ es

$$\phi_1(\tilde{\xi}_i) = m_{1,\xi_i}|\tilde{\xi}_i|^p \text{sign}(\tilde{\xi}_i) + m_{2,\xi_i}|\tilde{\xi}_i|^q \text{sign}(\tilde{\xi}_i)$$

$$\phi_2(\tilde{\xi}_i) = pm_{1,\xi_i}^2|\tilde{\xi}_i|^{2p-1} \text{sign}(\tilde{\xi}_i) + m_{2,\xi_i}^2q|\tilde{\xi}_i|^{2q-1} \text{sign}(\tilde{\xi}_i) + (p+q)m_{1,\xi_i}m_{2,\xi_i}|\tilde{\xi}_i|^{p+q-1} \text{sign}(\tilde{\xi}_i)$$

tal que se tiene el algoritmo AGSO en la dinámica del error para cada par de $(\tilde{\xi}_i, \tilde{\varphi}_i)$.

Observador	Ganancias y parámetros GSOA					
	l_1	l_2	p	q	m_1	m_2
OSTG	1	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	1	4
OAG	2	1	\dots	1	0	$\theta = 5$
STA-clásico	1	1	$\frac{1}{2}$	\dots	3	0

Tabla 5.3: Valores de parámetros en el algoritmo AGSO, observadores OSTG, OAG y STA-clásico

Con fines de comparación considere el caso particular donde la configuración de parámetros en las funciones no lineales en el observador son iguales para cada $\hat{\xi}_i$, es decir

$$\begin{aligned}
l_1 &= l_{1,\xi_1} = l_{1,\xi_2} = l_{1,\xi_3} \\
l_2 &= l_{2,\xi_1} = l_{2,\xi_2} = l_{2,\xi_3} \\
m_1 &= m_{1,\xi_1} = m_{1,\xi_2} = m_{1,\xi_3} \\
m_2 &= m_{2,\xi_1} = m_{2,\xi_2} = m_{2,\xi_3}
\end{aligned} \tag{5.14}$$

entonces, se tiene un sólo juego de parámetros m_1, m_2 y de ganancias l_1, l_2 para las tres dinámicas del error; tal que el OSTG con los valores de la Tabla (5.3) está dado por

$$\begin{aligned}
\dot{\tilde{\xi}}_i &= -|\tilde{\xi}_i|^{\frac{1}{2}} \text{sign}(\tilde{\xi}_i) - 4|\tilde{\xi}_i|^{\frac{3}{2}} \text{sign}(\tilde{\xi}_i) + \tilde{\varphi}_i \\
\dot{\tilde{\varphi}}_i &= -\frac{1}{2} \text{sign}(\tilde{\xi}_i) - 24|\tilde{\xi}_i|^2 \text{sign}(\tilde{\xi}_i) - 8\tilde{\xi}_i - \tilde{\varphi}_i
\end{aligned}$$

Debe notarse que en este caso la configuración de los términos de alto orden es con $q = \frac{3}{2}$, ya que con este valor también se tiene un término lineal en el término de corrección de error para φ_i .

Introduciendo las restricciones (5.14) para la configuración de ganancias y parámetros en el OSTG, es fácil derivar la aproximación propuesta para observadores de alta ganancia como se muestra a continuación.

Caso particular del OSTG: derivación de la aproximación de OAG

Con las restricciones de ganancias y de parámetros (5.14), es posible derivar un observador de alta ganancia considerando los valores de la Tabla (5.3), por lo que el OAG

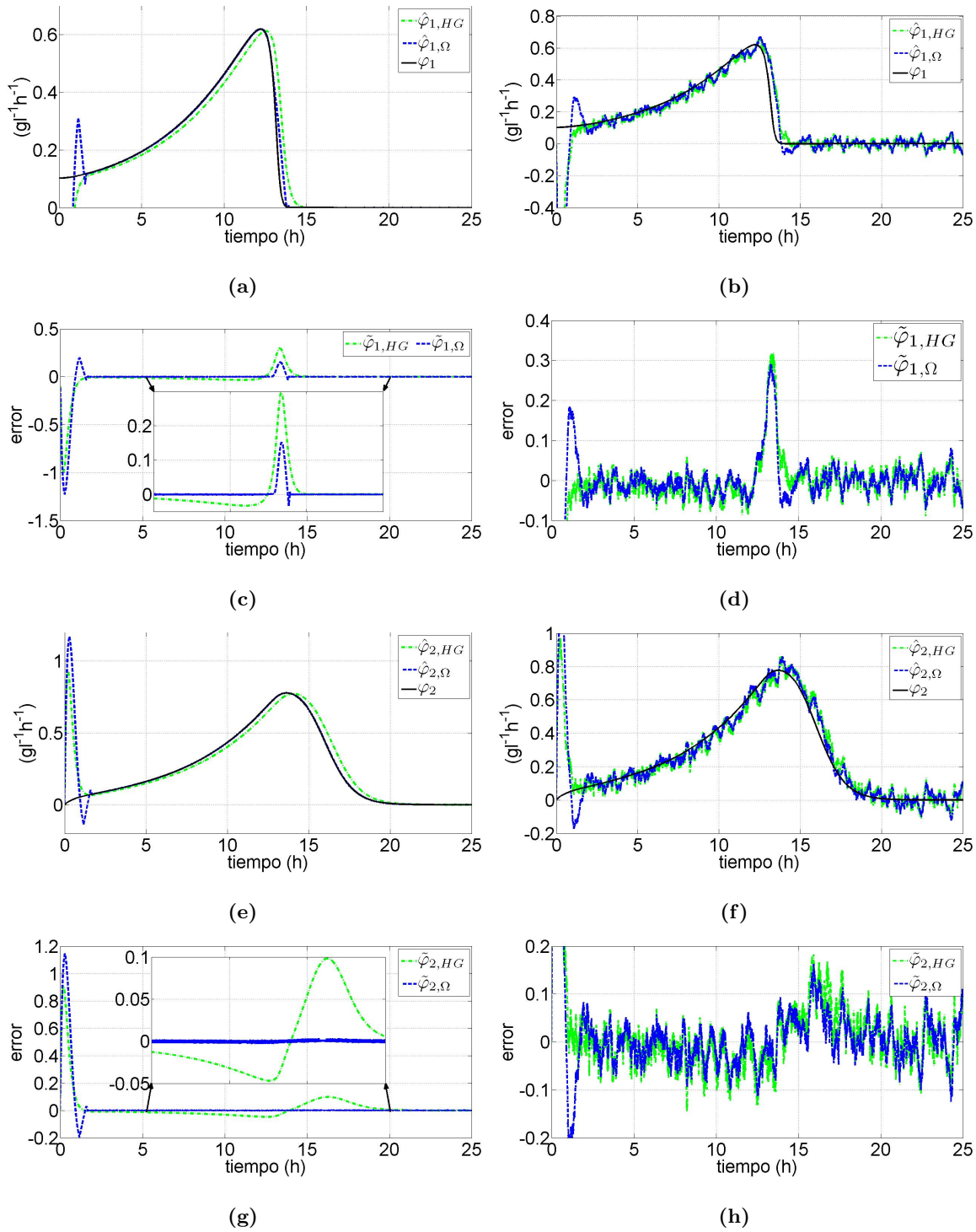
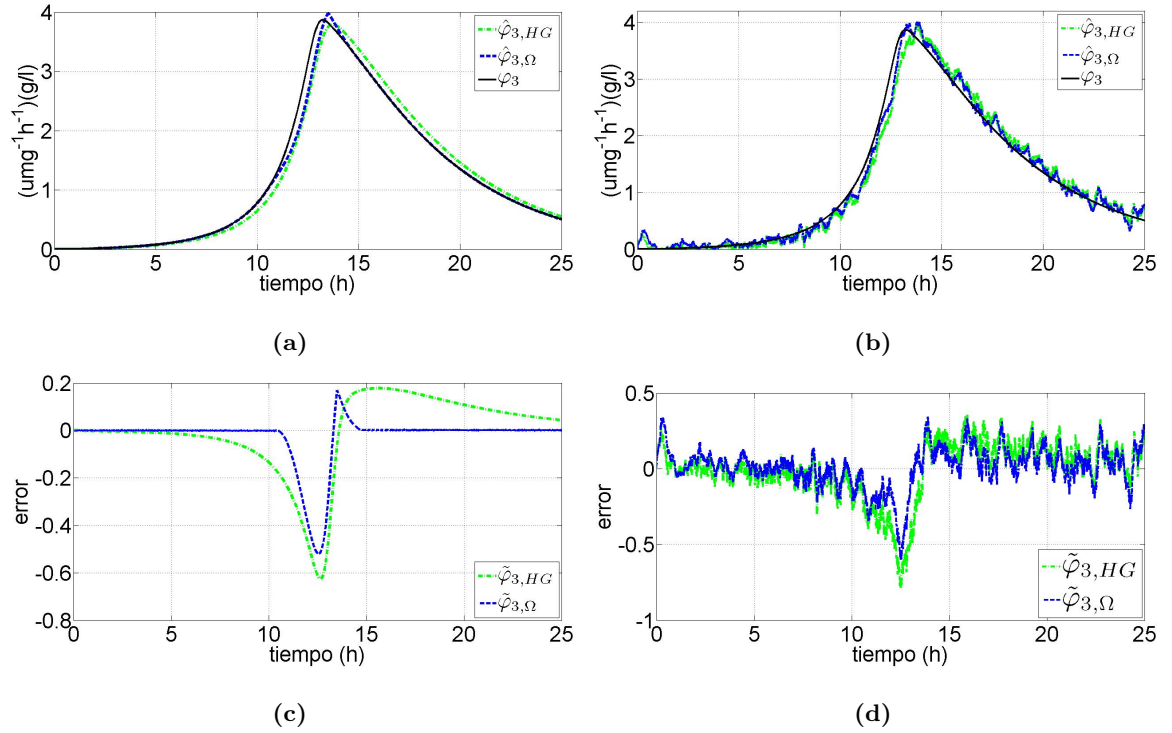


Figura 5.5: Estimación $\hat{\varphi}_{1,2}$ ideal y con ruido

Figura 5.6: Estimación $\hat{\varphi}_3$ ideal y con ruido

está dado por

$$\begin{bmatrix} \dot{\hat{\xi}}_1 \\ \dot{\hat{\xi}}_2 \\ \dot{\hat{\xi}}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\varphi}_1 \\ \hat{\varphi}_2 \\ \hat{\varphi}_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - 2\theta \begin{bmatrix} \tilde{\xi}_1 \\ \tilde{\xi}_2 \\ \tilde{\xi}_3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \dot{\hat{\varphi}}_1 \\ \dot{\hat{\varphi}}_2 \\ \dot{\hat{\varphi}}_3 \end{bmatrix} = -\theta^2 \begin{bmatrix} \tilde{\xi}_1 \\ \tilde{\xi}_2 \\ \tilde{\xi}_3 \end{bmatrix}$$

en el cual el único parámetro a ajustar es θ , no importando el número de reacciones que se tengan que reconstruir. Este tipo de configuración es propuesta en varios trabajos sobre el tema, ver [Farza98, Farza00, Selisteanu09, Selisteanu10].

Los resultados obtenidos del observador $\Omega_{\xi_L^c}$ se muestran en las figuras (5.5,5.6), donde adicionalmente se muestra los resultados con el observador de alta ganancia con $\theta = 5$.

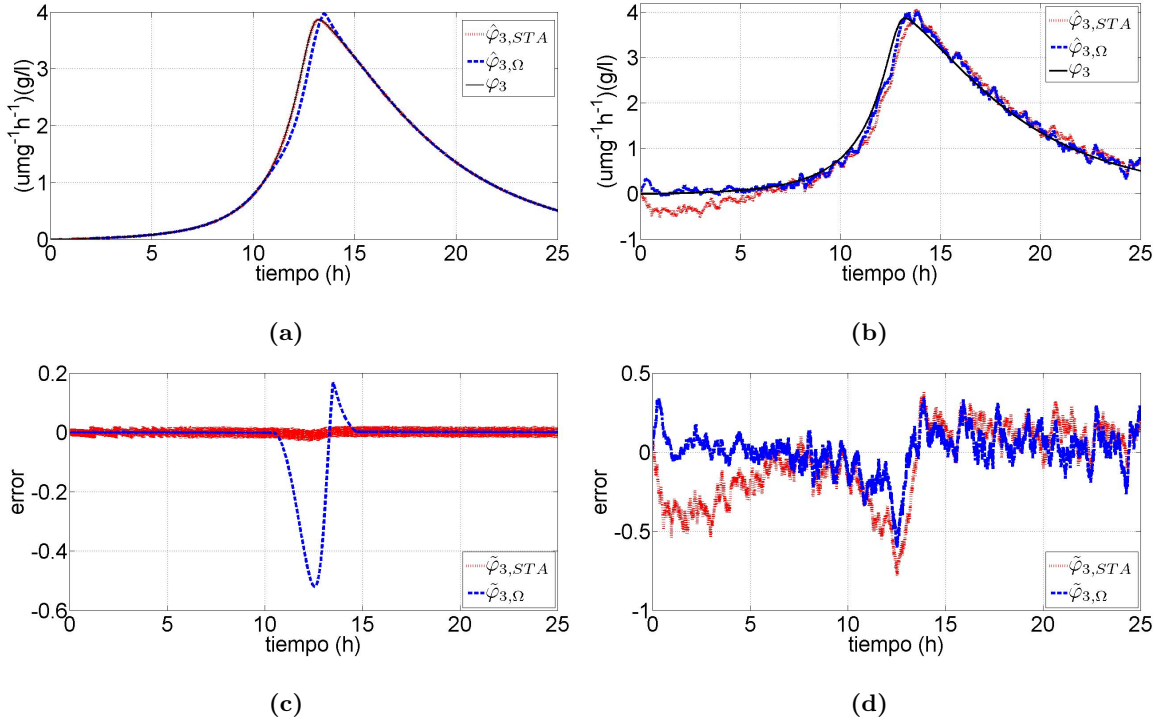


Figura 5.7: Resultados de estimación $\hat{\varphi}_3$ ideal y con ruido

Caso particular del OSTG: STA-clásico

Para mostrar las ventajas de los términos de alto orden presentes en el AGSO, también se diseña un observador basado en el algoritmo STA-clásico, que sólo contiene los términos de bajo orden. Con la restricción (5.14), se deriva el STA-clásico con los valores y ganancias de la Tabla (5.3).

La comparación del observador Ω_{ξ^q} con el observador STA-clásico se reporta en las figuras (5.7,5.8). Las condiciones de simulación son las mismas que para la comparación anterior. En el caso del observador basado en el algoritmo STA-clásico es necesario aumentar la ganancia para obtener una calidad aceptable en la estimación, lo que provoca un aumento en el efecto de *chattering*.

En este caso es interesante ver el comportamiento del error en la reconstrucción de la tasa de reacción φ_3 , ver figura (5.7). En el caso ideal, el error del STA-clásico se da con una menor desviación, aunque con un efecto de *chattering* de mayor magnitud, en

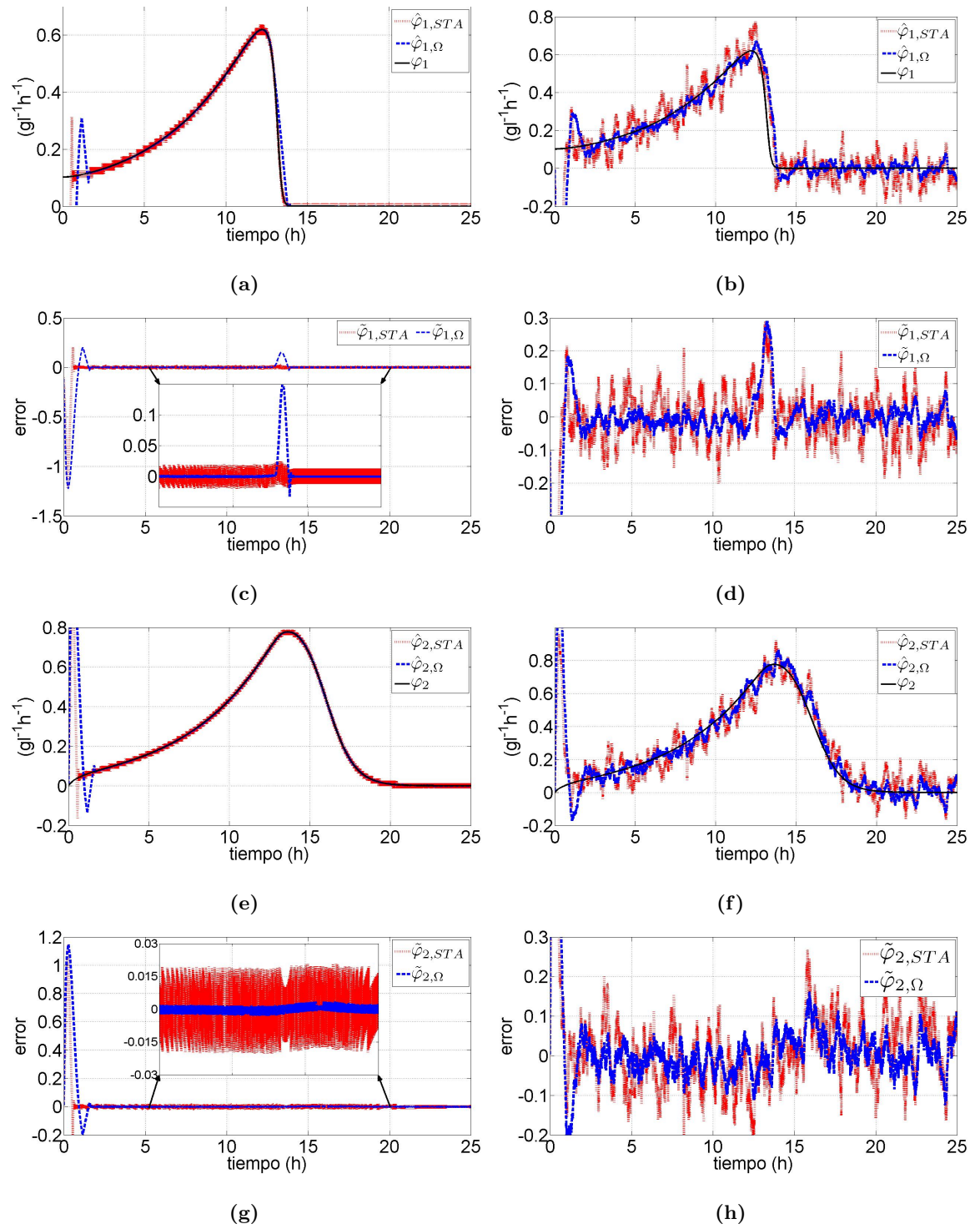


Figura 5.8: Resultados de estimación $\hat{\varphi}_{1,2}$ ideal y con ruido caso STA y OSTG

comparación con la del OSTG. En esta misma gráfica (figura (5.7)) se puede notar para el OSTG, cómo actúan los términos de alto orden (entre el periodo 10-15 (h)).

En el caso de presencia de ruido en las mediciones, la reconstrucción de φ_3 con el observador STA-clásico tiene una mayor desviación, como lo muestra la figura 5.7(d). Por el contrario, la desviación del error en el caso del OSTG se sigue conservando aproximadamente de la misma magnitud.

5.2.3. Conclusiones del ejemplo de producción de lipasa: Observador OSTG, OAG y STA-clásico

Tomando en cuenta que definir una cota para las tasas de reacción se puede dar de forma imprecisa, es decir que no se sabe con exactitud cuál es la cota de cada una de las reacciones a estimar, el experimento de simulación aquí propuesto cobra sentido; puesto que aún cuando la calibración de los términos de bajo y/o alto orden no sean los más adecuados, es decir la calibración del observador no sea la mejor, el hecho de utilizar ambas clases de términos provee al estimador de una mayor robustez.

Frente a cambios bruscos en las tasas de reacción los términos de alto orden tienen un mayor peso en la corrección del error. En contraste, en caso de que el cambio en la tasa de reacción sea pequeña los términos de bajo orden tendrán una mayor significación. Esa precisamente es la ventaja de utilizar un OSTG para reconstruir las tasas de reacción, tener un algoritmo de ganancia variable que permite tratar una clase de perturbaciones más amplia que sus casos particulares como el OAG y el STA-clásico.

5.3. Ejemplo 3: Crecimiento de fitoplancton marino

Contrario a los ejemplos anteriores, en este caso el sistema que se trata tiene objetivos de estimación que derivan de la práctica y que además no han sido reportados en trabajos anteriores. El sistema que se estudia es el crecimiento de fitoplancton marino, el cual encuentra aplicación para la producción de biodiesel mediante el cultivo de algas marinas.

A través de su desarrollo se muestran las diferentes posibilidades y variaciones

para obtener un estimado de las tasas de reacción y de parámetros que contienen, y en un segundo paso la estimación de las variables de estado no medidas.

En el caso de la estimación de las tasas de reacción específicas, los resultados son comparados con observadores de alta ganancia (OAG). Para el caso de la estimación de estado se exploran tres diferentes variaciones.

5.3.1. Modelo de fitoplancton marino

Un modelo simplificado que representa el crecimiento de fitoplancton reportado en [Pawlowski02], está dado por

$$\Sigma_P \left\{ \begin{array}{l} \dot{S} = -\rho_m \frac{S}{S+K_s} C + D[S_{in} - S] \\ \dot{N} = \rho_m \frac{S}{S+K_s} C - \gamma(I) N \frac{L}{C} - DN + \beta L \\ \dot{L} = \gamma(I) N \frac{L}{C} - DL - \beta L \\ \dot{C} = a(I)L - DC - \lambda C \end{array} \right. \quad (5.15)$$

donde las variables de estado están denotadas como S es la fuente de nitrógeno, N el consorcio celular de nitrógeno, L las proteínas clorofílicas y C el carbono particulado; D es la tasa de dilución (escalar), S_{in} es la fuente de nitrato, λ es un factor en el término de tasa de respiración, β es un coeficiente en el término de tasa de degradación de clorofila; finalmente I es la intensidad luminosa, $a(I)$ es la tasa de fotosíntesis, $\gamma(I)$ es la síntesis de proteínas. Se considera que $a(I)$ y $\gamma(I)$ están dadas por

$$a(I) = \frac{\alpha I}{k_I + I} \quad (5.16)$$

$$\gamma(I) = a(I) \frac{K_L K_C}{K_C + I} \quad (5.17)$$

Para propósitos de simulación se tomó en cuenta un periodo de 25 días, la tasa de dilución es nula en los primeros 3 días (periodo de lote), después es puesta a un valor constante $D = 0.4[d^{-1}]$. La intensidad luminosa es variante en el tiempo siguiendo periodos día-noche, y para los últimos días $19[d]$ a $25[d]$ es puesta a un valor constante. Los parámetros y condiciones iniciales del modelo son mostrados en la tabla (5.4).

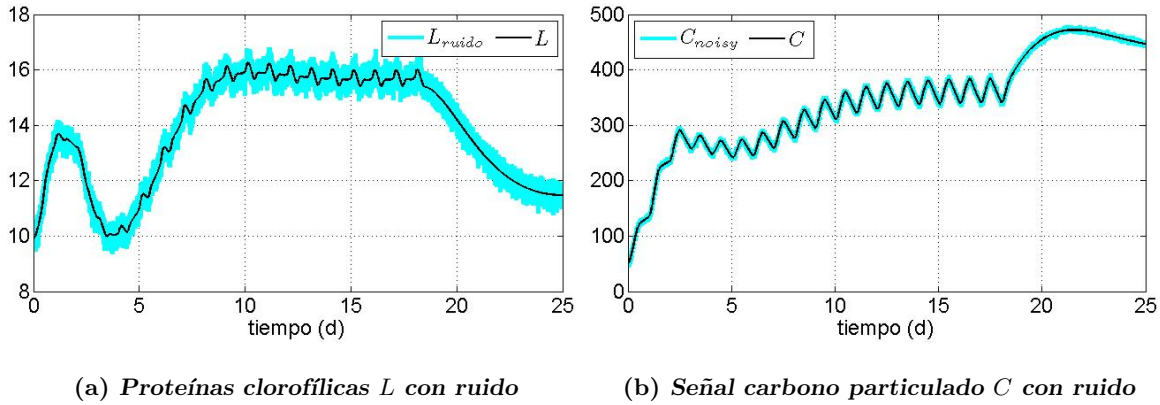


Figura 5.9: Condiciones de señales medidas utilizadas en simulación

C.I de variables de estado	Valores de parámetros
$S(0) = 10(\mu\text{mol N.L}^{-1})$	$\rho_m = 0.5(\mu \text{ molN.molC}^{-1}.\text{d}^{-1})$
$N(0) = 0.3(\mu\text{mol N.L}^{-1})$	$K_S = 0.43(\mu \text{ M N})$
$L(0) = 10(\mu\text{mol N.L}^{-1})$	$K_L = 6.59(\text{n.d})$
$C(0) = 50(\mu\text{mol C.L}^{-1})$	$K_C = 33(\mu \text{ mol quanta.m}^{-2}.\text{s}^{-1})$
	$\alpha = 24.1(\text{d}^{-1})$
	$K_I = 208.5(\mu \text{ mol quanta.m}^{-2}.\text{s}^{-1})$
	$\lambda = 0.054(\text{d}^{-1})$
	$\beta = 0.345(\text{d}^{-1})$
	$S_{in} = 40(\mu\text{mol N.L}^{-1})$

Tabla 5.4: Ejemplo Fitoplancton marino: Condiciones iniciales y valores de parámetros en el modelo

Las posibilidades son ejemplificadas mediante escenarios que corresponden a objetivos de observación con diferentes variaciones y suposiciones acerca de lo que se conoce en el modelo (5.15). Para cada uno de estos casos se muestran resultados cuando las mediciones de (L, C) están libres de ruido y en presencia de ruido blanco gaussiano. En el caso de mediciones con ruido, a las señales (L, C) se les suma ruido blanco con una amplitud de aproximadamente 5% del máximo valor de cada señal, como se muestra en la figura (5.9).

5.3.2. Escenario 1: Estimación de tasa de fotosíntesis

En esta parte, primero se considera un ESTV para reconstruir le tasa de fotosíntesis (5.16), suponiendo que en (5.15) las condiciones son: los estados medidos son (L, C) y que

Observador	Parámetros					
	p	q	m_1	m_2	l_1	l_2
$\Omega_{F,1}$	1/2	1	4	1	6	1
$\Omega_{F,2}$	1/2	1	8	2	1	2

Tabla 5.5: Valores de calibración observadores

(λ, D) son conocidos. Para tales propósitos se considera un subsistema de (5.15), que es

$$\Sigma_{P,2} \begin{cases} \dot{C} = -(D + \lambda)C + aL \\ \dot{a} = \delta_1(t) \end{cases} \quad (5.18)$$

donde para acortar la notación se hace $a(I) = a$, y donde el parámetro variante en el tiempo a ser estimado es a y su derivada es $\delta_1(t)$. Primero, considerando el ESTV dado por

$$\Omega_{F,1} \begin{cases} \dot{\hat{C}} = -(D + \lambda)C + \hat{a}L - l_1\phi_1(\tilde{C}) \\ \dot{\hat{a}} = -l_2\phi_2(\tilde{C})L \end{cases} \quad (5.19)$$

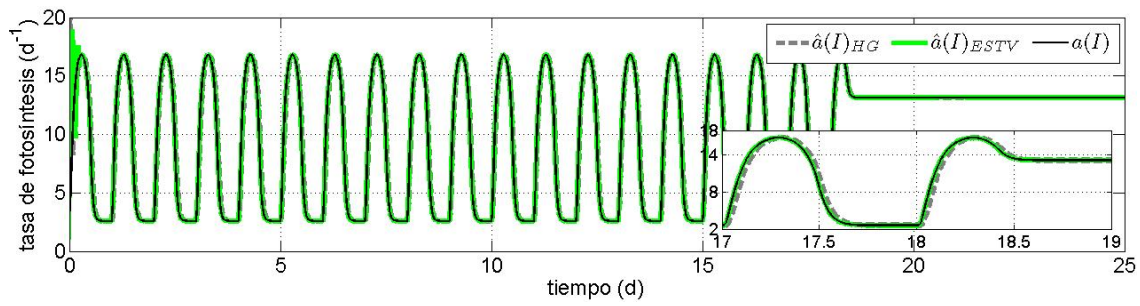
donde la definición de error es $\tilde{C} = \hat{C} - C$, $\tilde{a} = \hat{a} - a$, $l_1\phi_1(\tilde{C})$ y $l_2\phi_2(\tilde{C})$ son los términos no lineales de corrección en el observador, ver sección 4.2; L es considerado como regresor y es escalar.

Aquí, se puede obtener como casos particulares la aproximación con observadores de alta ganancia [Farza98] o un estimador de regresión lineal como lo propuesto en [Bastin90]. En este caso el estimador propuesto (5.19) se compara con un observador de alta ganancia dado por

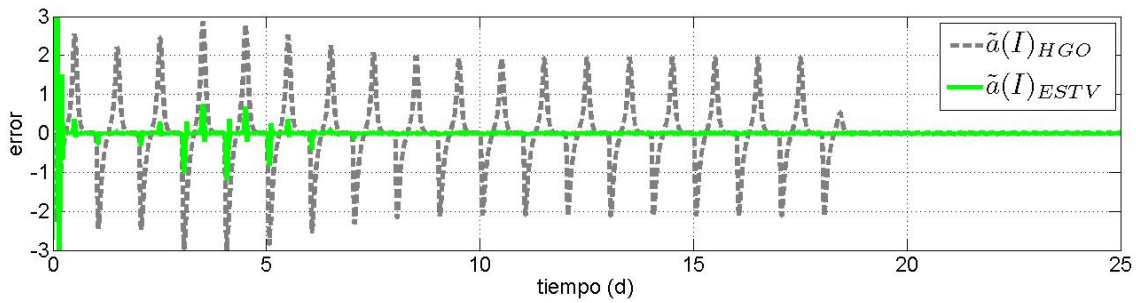
$$\Omega_{HG} \begin{cases} \dot{\hat{C}} = -(D + \lambda)C + \hat{a}L - 2\theta L[\hat{C} - C] \\ \dot{\hat{a}} = -\theta^2 L[\hat{C} - C] \end{cases} \quad (5.20)$$

donde la ganancia es fijada en $\theta = 7$. Los parámetros y ganancias para el observador (5.19) son mostrados en la Tabla (5.5).

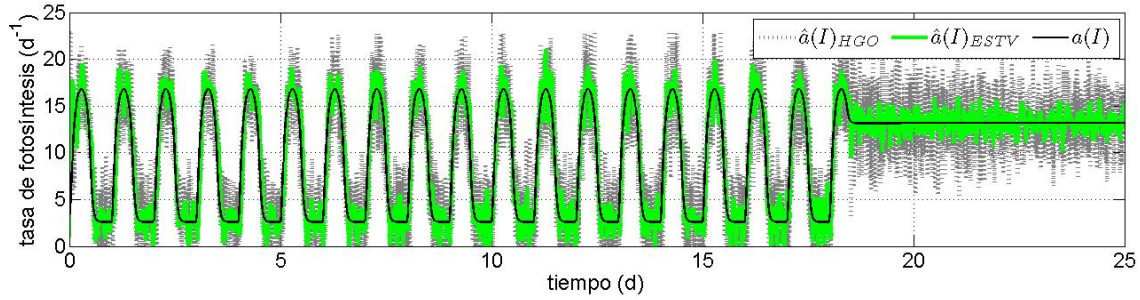
Los resultados son mostrados en las figuras (5.10(a),5.10(b)), donde las medidas son consideradas libres de ruido. Es importante notar la diferencia en la convergencia de ambos observadores puesto que en el caso de del ESTV (5.19) la convergencia se da en tiempo finito y es exacta; por el contrario para el OAG el error de estimación permanecerá acotado en una región.



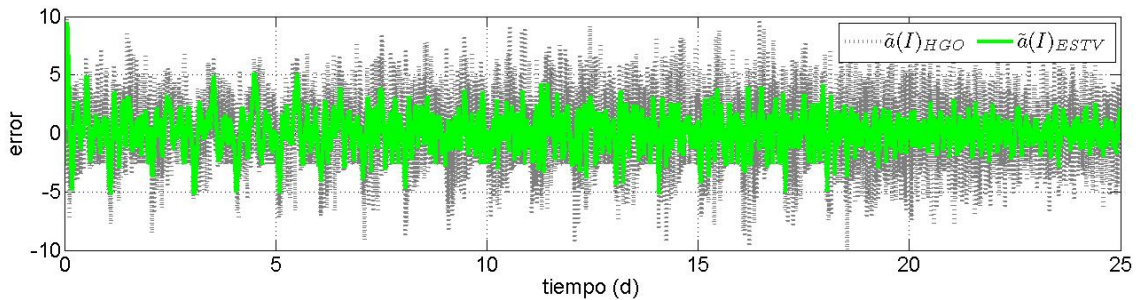
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.10: Resultados de estimación $\hat{a}(i)$ ideal y con ruido

Los resultados en presencia de ruido son reportados en las figuras (5.10(c),5.10(d)), donde se puede apreciar que en el caso de la reconstrucción de a los resultados muestran un menor desviación en el error y un mejor rechazo al ruido por parte del observador (5.19). En el caso de los ciclos noche-día para la intensidad luminosa la estimación del ESTV es capaz de reconstruir la señal a con menos error en magnitud que el OAG. Lo mismo es cierto para el periodo en el que la luz es constante, es decir entre los días $17[d] - 20[d]$ donde se puede apreciar claramente que el rechazo de ruido es mejorado.

5.3.3. Escenario 2: ESTV para la estimación de N

En este escenario se suponen funciones analíticas para las tasas de fotosíntesis y la síntesis de proteínas y se considera que sus parámetros son conocidos; se remarca el hecho de que la intensidad luminosa (I) es considerada como desconocida. Entonces, la intensidad luminosa puede obtenerse de (5.16), y queda dado por la relación

$$\hat{I} = \frac{K_I \hat{a}}{\alpha - \hat{a}} \quad (5.21)$$

donde \hat{a} es dado por (5.19).

Ahora, por medio de \hat{a} e \hat{I} la tasa de síntesis de proteínas puede obtenerse como

$$\hat{\gamma} = \hat{a} \frac{K_L K_C}{K_C + \hat{I}} \quad (5.22)$$

donde para acortar la notación $\gamma(I) = \gamma$, para evitar las singularidades en (5.21), \hat{a} es saturado a 95 % de su máximo valor que es α .

En este escenario la estimación de N se realiza con un ESTV. Para hacer esto, se asume que sólo (L, C) es medido y que (D, β) son conocidos.

De (5.15) se toma en cuenta la dinámica L , tal que se tiene el sistema extendido

$$\Sigma_{F,2} \begin{cases} \dot{L} = \gamma \frac{L}{C} N - DL - \beta L \\ \dot{N} = \delta_2(t) \end{cases} \quad (5.23)$$

donde $(\gamma \frac{L}{C})$ es considerado como el regresor y es conocido, y el estado no medido N es considerado como un parámetro variante en el tiempo; por lo que es posible plantear el siguiente estimador

$$\Omega_{F,2} \begin{cases} \dot{\tilde{L}} = \hat{\gamma} \frac{\tilde{L}}{C} \hat{N} - D\tilde{L} - \beta\tilde{L} - l_1 \phi_1(\tilde{L}) \\ \dot{\hat{N}} = -l_2 \phi_2(\tilde{L}) \hat{\gamma} \frac{\tilde{L}}{C} \end{cases} \quad (5.24)$$

donde la definición del error es $\tilde{L} = \hat{L} - L$. Se debe notar que en (5.24), para reconstruir el regresor la síntesis de proteína γ es considerado como medible. Esta consideración es hecha, debido a que al inicio de este escenario la intensidad luminosa es estimada (provisto por el ESTV del escenario anterior (5.19)) y entonces la síntesis de proteínas fue obtenida (5.22).

En este caso se debe notar que en (5.24) no es necesario medir la fuente de sustrato S para estimar al estado N ; y que además la velocidad de convergencia del error de estimación es asignable. Los parámetros y ganancias para el observador (5.24) son mostrados en la Tabla (5.5). Los resultados son mostrados en las figuras (5.11) y discutidos más adelante.

5.3.4. Escenario 3: Estimación de estado N

Como se ha venido haciendo a lo largo de este trabajo, en este escenario para estimar el estado N de (5.15) consideramos la dinámica del nitrógeno

$$\dot{N} = \rho_m \frac{S}{S + K_s} C - \gamma(I)N \frac{L}{C} - DN + \beta L$$

tal que el observador correspondiente está dado por

$$\dot{\hat{N}} = \rho_m \frac{S}{S + K_S} C - \hat{\gamma} \hat{N} \frac{L}{C} - D\hat{N} + \beta L \quad (5.25)$$

donde $(\hat{\gamma})$ es dada por (5.22) considerado como medible al igual que S ; el error es definido como $\tilde{N} = \hat{N} - N$, tal que la dinámica del error está dada por

$$\dot{\tilde{N}} = -[\hat{\gamma} \hat{N} - \gamma N] \frac{L}{C} - D[\hat{N} - N]$$

Los resultados de (5.25) se muestran junto con los resultados de los siguientes escenarios en las figuras (5.11) para ambos casos: con y sin ruido en las señales de (L, C) .

5.3.5. Escenario 4: Observador Asintótico para estimar N

Finalmente, consideramos un OA para estimar el consorcio celular de nitrógeno. Se asume que no se tiene ningún conocimiento de las tasas de reacción $a(I)$ y $\gamma(I)$, y es necesario suponer que (L, C, S) es medido. Entonces, definiendo la variable auxiliar $\zeta = N + L$, tal que

$$\dot{\zeta} = -D\zeta + \rho_m \frac{S}{S + K_S} C$$

y el OA dado por

$$\hat{\zeta} = -D\hat{\zeta} + \rho_m \frac{S}{S + K_S} C$$

en la dinámica del error se tiene

$$\dot{\tilde{\zeta}} = -D\tilde{\zeta}$$

Si se considera que la tasa de dilución (D) cumple la condición de excitación persistente; entonces, un estimado del nitrógeno está dado por

$$\hat{N} = \hat{\zeta} - L \quad (5.26)$$

Es bien sabido que el OA es capaz de estimar los estados faltantes (no medidos) evitando el conocimiento de la tasa de reacción, para esto es necesario definir una combinación lineal de la parte medible y no medible del vector de estados; la velocidad de convergencia no es asignable, y es tal que depende de las condiciones en las que se lleve a cabo el proceso. En este caso, la velocidad de convergencia depende de la tasa de dilución (D).

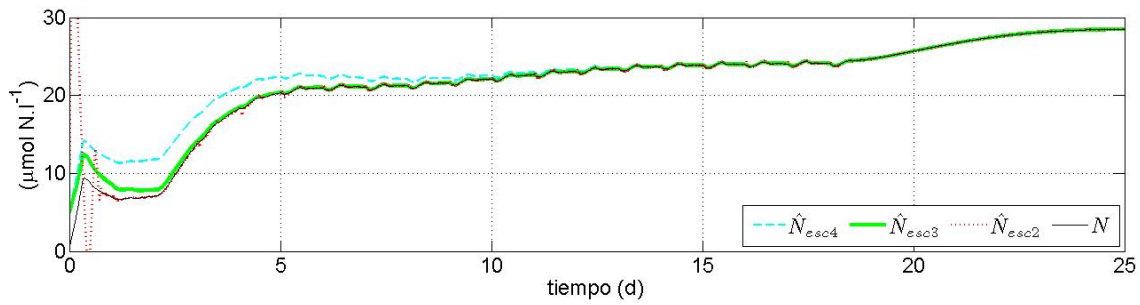
Es importante notar que con esta aproximación no es posible obtener un estimado de la intensidad luminosa. Los resultados de (5.26) son reportados en las figuras (5.11) y discutidas en la siguiente sección.

5.3.6. Resultados de estimación de N bajo los diferentes escenarios

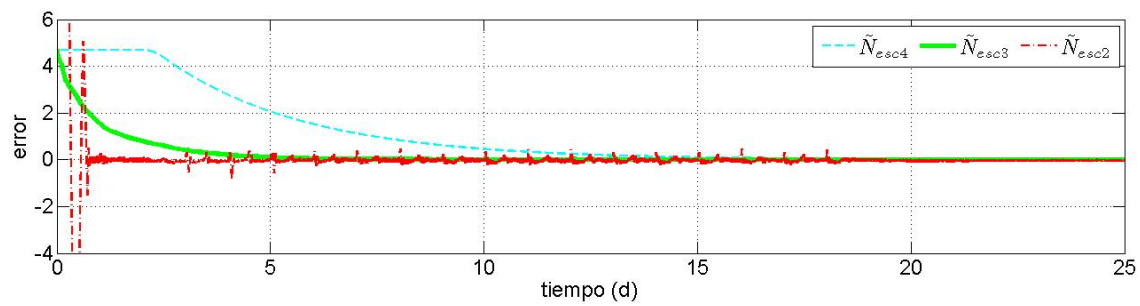
En esta sección, las tres variaciones para estimar N son discutidas. Las variaciones corresponden a los estimados obtenidos por (5.24),(5.25),(5.26) que en las gráficas (5.11(a),5.11(c)) corresponden a N_{esc2} , N_{esc3} , N_{esc4} . Las condiciones iniciales son las mismas para las 3 variaciones.

Se hace notar que únicamente en el caso del escenario 2, (5.24), la velocidad de convergencia del error \tilde{N} es asignable; pero su sensibilidad a ruido en la medición es mayor que en los otros dos casos.

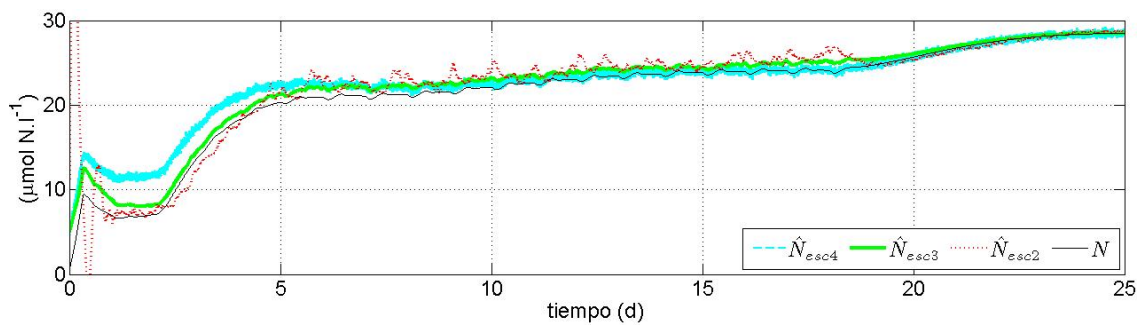
Para el observador asintótico (5.26), escenario 4, hay que recordar que para los primeros 3 días el reactor funciona en modo de lote, lo que causa un error constante al comienzo de la simulación. A partir del tercer día, se puede observar cómo converge dado que $D \neq 0$.



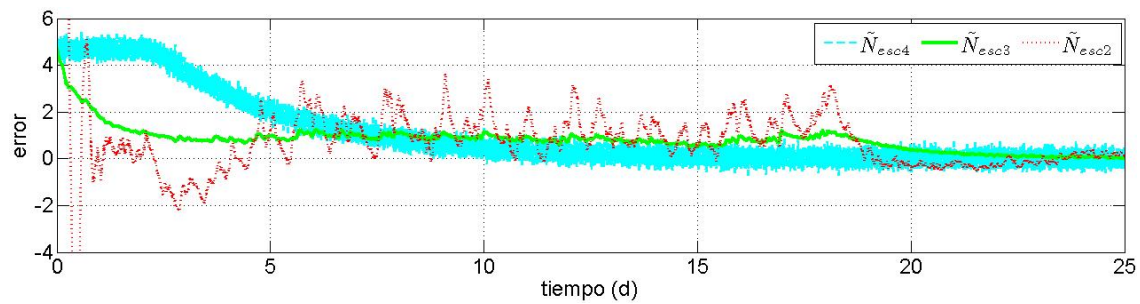
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.11: Diferentes formas de estimar N , escenarios 1,2 y 3

Es importante notar la velocidad de convergencia para el observador (5.25), del escenario 3, y su buen rechazo al ruido. Aún cuando en algunos periodos de tiempo (10-18 (d)) el error es mayor que el del OA, el periodo de tiempo (0-3 (d)) en el que el reactor está en modo lote la convergencia no se mantiene en un valor constante como en el caso del OA.

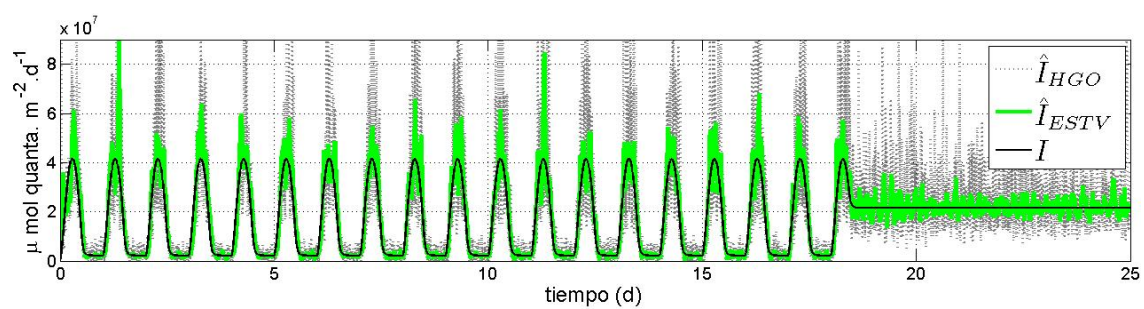
Resulta difícil establecer cuál variación ofrece mejores resultados porque se suponen diferentes grados de conocimiento en el modelo. Pero basándose solamente en los resultados de la simulación, se puede decir que el mejor estimado es el obtenido bajo el escenario 3, puesto que ofrece el mejor compromiso entre velocidad de convergencia y rechazo a ruido.

5.3.7. Resultados para la estimación de intensidad luminosa

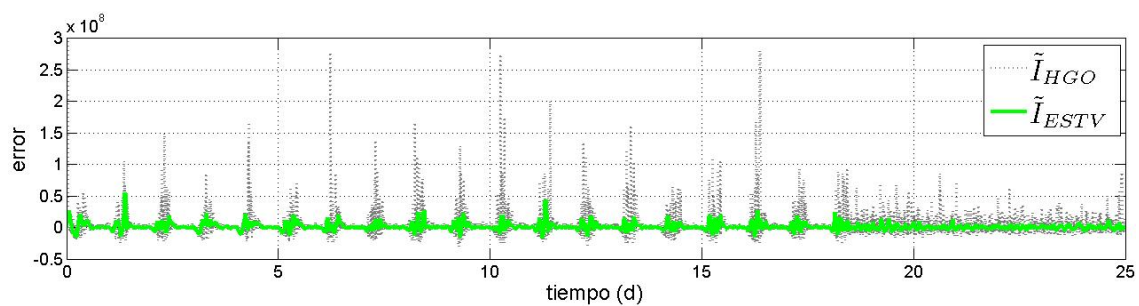
Recordando que en este ejemplo es de importancia práctica obtener un estimado de la intensidad luminosa I , se muestran a continuación los resultados de estimación dados por la relación (5.21). Como para cada uno de los observadores (5.19,5.20) se obtuvo un estimado de la tasa de fotosíntesis $a(I)$, entonces se utilizó la relación algebraica (5.21) para obtener un estimado de I , también para cada uno de ellos.

En la figura (5.12(a)) se muestran ambos estimados para la intensidad luminosa I con presencia de ruido en las mediciones, y en la figura (5.12(b)) se muestran los errores correspondientes.

Como se puede observar, el estimado \hat{I}_{ESTV} ofrece mejores resultados que el dado por \hat{I}_{HGO} . El hecho de que la presencia de ruido se vea magnificada en ambos estimados, es debido a que la relación (5.21) es no lineal y que la diferencia de magnitudes entre valores es enorme. Es decir, las unidades de I están en el orden de 10^7 , mientras que en el caso de $a(I)$ están en el orden de las decenas, por lo que se genera un problema numérico en el simulador.



(a)



(b)

Figura 5.12: Resultados de estimación I con relación 5.21, observadores HGO y ESTV

Capítulo 6

Resultados y conclusiones

Para finalizar se da un breve resumen que da cuenta del trabajo realizado, enfatizando los aportes originales, conclusiones y trabajo futuro.

6.1. Resultados y trabajo realizado

El objetivo principal de este trabajo en un principio se planteó como: estimar las tasas de reacción en bioprocesos utilizando una nueva clase de observadores, mediante ejemplos de simulación numérica para diferentes sistemas reportados en la literatura; además se realizó la aplicación de los observadores aquí propuestos para bioprocesos mediante su modelo general.

Los casos de estudio reportados en las secciones 4.1, 5.1 y 5.2, corresponden a ejemplos que ya han sido reportados y en los cuales la estimación se da sin un conocimiento de las tasas de reacción. Es por ello que se realizó la comparación correspondiente bajo condiciones que otros autores proponen.

Para el caso de la sección 5.3, el sistema sobre el que se trabaja no ha sido reportado para efectos de estimación razón por la cual se plantearon diferentes escenarios y se compararon con otros tipos de observadores y/o estimadores.

En todos los ejemplos, se muestran resultados en el caso ideal y en presencia de ruido en las mediciones; y se muestra que es posible obtener mejores resultados de estimación mediante la calibración adecuada de los observadores OSTG.

Un resultado inmediato de obtener un estimado de la tasas de reacción es utilizarlo como una cantidad conocida en la parte del modelo que contiene las variables de estado no medidas, lo que permite obtener un mejor rechazo a ruido (comparado con un OA) y de lo cual no se tiene conocimiento de que haya sido reportado.

Como actividad derivada de este trabajo de tesis, se contribuyó en el artículo [Vargas11] que fue aceptado en el “Congreso Mundial del IFAC, 2011” y que tuvo lugar en Milano, Italia. En este trabajo, la tasa de reacción es utilizada con propósitos de control por retroalimentación de salida, en un proceso de tratamiento de agua residual (ver apéndice B).

También se presentó un artículo en el Congreso Anual de la Asociación Mexicana de Control Automático (AMCA, 2011) celebrado en la ciudad de Saltillo, Coahuila. En este artículo se expone de forma condensada, y mediante un caso de estudio, los principales aportes de este trabajo de tesis (ver apéndice C).

6.2. Aportes

Los principales aportes de este trabajo son:

- La generalización de observadores OSTG aplicados a bioprocesos utilizando el modelo general, dando las condiciones de cuándo es posible estimar todas y cada una de las tasas de reacción y todos los estados no medibles.
- Los resultados que se obtuvieron dejan ver características de los OSTG que no habían sido comparadas, como el caso de ruido en las mediciones, y a su vez la comparación con los resultados obtenidos con observadores OAG, que son su más cercano competidor.
- Además de lo anterior se reporta el algoritmo ESTV, el cual es una contribución original derivada de este trabajo.

6.3. Conclusiones

La aplicación OSTG deja aún algunas interrogantes, como por ejemplo cómo obtener de forma sistemática una configuración de parámetros y ganancias tal que siempre sea posible mejorar los resultados de un OAG. Lo que se puede esbozar es que necesariamente el término de ganancia asociado a la parte lineal (de donde se obtiene la derivación de alta ganancia) debe ser menor en el caso del OSTG.

Es sabido que en el caso de observadores OAG, la ganancia θ puede ser incrementada arbitrariamente hasta que la región que acota al error sea lo suficientemente pequeña como uno quiera; pero esto en el caso de mediciones con ruido se debe tener en cuenta el compromiso entre velocidad de convergencia y rechazo de ruido.

Obviamente esto también aplica al caso de los observadores OSTG, pero la selección de ganancias y principalmente de los parámetros hacen que esta configuración sea más flexible de tal forma que se puede obtener una buena velocidad de convergencia y un rechazo al ruido mejor que en el caso de observadores de alta ganancia. La razón principal de este hecho es la posibilidad de ponderar las diferentes clases de términos que contienen los OSTG.

Se puede establecer la configuración de ganancias en el OSTG como lo establecido en [Moreno11], lo que deja resultados en ocasiones insatisfactorios dada la presencia de ruido en las mediciones. De forma cualitativa, el sistema que se tiene es de segundo orden, en el que básicamente las dinámicas de error son los estados del sistema, y mediante los términos de compensación del error se tiene un comportamiento deseado. Los términos de compensación de error ϕ_1 y ϕ_2 deben ser configurados de tal forma que sean ligeramente mayores en magnitud que el término de perturbación, pero en presencia de ruido el compromiso rechazo a ruido-velocidad de convergencia debe tenerse en cuenta. Por esta razón, algunas veces es deseable configurar el algoritmo fuera de las restricciones dadas en [Moreno11].

Es importante aclarar que si se configuran las ganancias del observador fuera de las restricciones dadas en [Moreno11], sólo se pierde la propiedad de convergencia exacta en el observador pero no la condición de estabilidad. Es decir, el error del observador permanecerá acotado en una región cuando los términos de corrección del error sean menores en

magnitud a la perturbación.

6.4. Trabajo futuro

Hay una lista de diversos tópicos que pueden tener a este trabajo como base y/o incentivo, pero podemos resumirlos principalmente en:

1. La validación del esquema de observación aquí propuesto en diversos bioprocesos;
2. Utilizar las tasas de reacción estimadas para implementar nuevas técnicas de control;
3. Una vez que se tiene un estimado de las tasa de reacción, proponer una función analítica para la(s) tasa(s) de reacción y/o identificar los parámetros que contienen;
4. Analizar el caso en el que se tengan mediciones con periodos de muestro grandes para el observador (versión discreta del observador) y
5. Establecer condiciones para configurar las ganancias y parámetros en el OSTG y en el ESTV de forma metódica considerando que se tiene un cierto nivel de ruido en las mediciones.

Apéndice A

Algoritmo Super-Twisting Variante

Considerando un sistema de la forma

$$\left. \begin{aligned} \dot{x}_1 &= -l_1\phi_1(x_1) + a(t)x_2 \\ \dot{x}_2 &= -l_2\phi_2(x_1)a(t) \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.1})$$

donde $a(t)$ cumple con $\beta \geq a(t) \geq \alpha > 0$, y ϕ_1 y ϕ_2 dadas por

$$\begin{aligned} \phi_1(e_1) &= m_1|e_1|^p \text{sign}(e_1) + m_2|e_1|^q \text{sign}(e_1) \\ \phi_2(e_1) &= m_1^2 p |e_1|^{2p-1} \text{sign}(e_1) + m_1 m_2 (p+q) |e_1|^{p+q-1} \text{sign}(e_1) + m_2^2 q |e_1|^{2q-1} \text{sign}(e_1) \end{aligned}$$

con $m_1, m_2 \geq 0$ y $q \geq 1 \geq p \geq \frac{1}{2}$, y donde se satisface que

$$\phi_2(x_1) = \phi_1'(x_1)\phi_1(x_1) \quad (\text{A.2})$$

Para el sistema (A.1), y con l_1, l_2 constantes positivas, considere la siguiente función candidata de Lyapunov cuadrática

$$V(x) = \zeta^T P \zeta,$$

donde

$$\zeta = \begin{bmatrix} \phi_1(x_1) \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad P = P^T = \begin{bmatrix} P_1 & P_3 \\ P_3 & P_2 \end{bmatrix} > 0$$

Ahora bien, la derivada de la función candidata de Lyapunov está dada por

$$\dot{V}(x) = \dot{\zeta}^T P \zeta + \zeta^T P \dot{\zeta} \quad (\text{A.3})$$

donde la derivada de ζ está dada por

$$\dot{\zeta} = \begin{bmatrix} \phi_1'(x_1)\dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1'(x_1)[-l_1\phi_1(x_1) + a(t)x_2] \\ -l_2\phi_2(x_1)a(t) \end{bmatrix}$$

usando la relación (A.2)

$$\dot{\zeta} = \phi_1'(x_1) \begin{bmatrix} -l_1\phi_1(x_1) + a(t)x_2 \\ -l_2\phi_1(x_1)a(t) \end{bmatrix}$$

con la matriz cuadrada

$$A = \begin{bmatrix} -l_1 & a(t) \\ -l_2a(t) & 0 \end{bmatrix}$$

entonces

$$\dot{\zeta} = \phi_1' \begin{bmatrix} -l_1 & a(t) \\ -l_2a(t) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1(x_1) \\ x_2 \end{bmatrix}$$

por lo que se puede escribir

$$\dot{\zeta} = \phi_1' A \zeta$$

Y la derivada de la función de Lyapunov queda como

$$\dot{V}(x) = \phi'(x_1)\zeta^T(A^T P + P A)\zeta = -\phi'(x_1)\zeta^T Q(t)\zeta$$

donde $Q(t)$ es una matriz positiva definida $Q(t) > \epsilon I$, que satisface la siguiente ecuación algebraica de Lyapunov

$$A^T P + P A = -Q(t) \quad (\text{A.4})$$

Para hallar una matriz Q que satisfaga (A.4), considere que

$$A^T P + P A = - \begin{bmatrix} 2(l_1 P_1 + a(t)l_2 P_3) & l_1 P_3 + a(t)l_2 P_2 - a(t)P_1 \\ l_1 P_3 + a(t)l_2 P_2 - a P_1 & -2a(t)P_3 \end{bmatrix}$$

y considerando que $A^T P + P A = Q(t)$, y que $Q(t) > \epsilon I$ entonces

$$\begin{bmatrix} 2(l_1 P_1 + a(t)l_2 P_3) - \epsilon & l_1 P_3 + a(t)l_2 P_2 - a(t)P_1 \\ l_1 P_3 + a(t)l_2 P_2 - a(t)P_1 & -2a(t)P_3 - \epsilon \end{bmatrix} \geq 0$$

por lo que para cumplir que $Q(t) - \epsilon I \geq 0$, se debe satisfacer las siguientes desigualdades

$$-2a(t)P_3 - \epsilon \geq 0 \quad (\text{A.5})$$

y que

$$-(2a(t)P_3 + \epsilon) [2(l_1P_1 + a(t)l_2P_3) - \epsilon] - [l_1P_3 + a(t)(l_2P_2 - P_1)]^2 \geq 0 \quad (\text{A.6})$$

Además para que la matriz P sea positiva definida, se debe cumplir para P que

$$P_1 > 0 \quad (\text{A.7})$$

y que

$$P_1P_2 - P_3^2 > 0 \quad (\text{A.8})$$

Entonces, de la desigualdad (A.5), se tiene que

$$P_3 < -\frac{\epsilon}{2a(t)}$$

tomando las cotas de $a(t)$, se tiene

$$-\frac{\epsilon}{2\beta} \leq -\frac{\epsilon}{2a(t)} \leq -\frac{\epsilon}{2\alpha}$$

por lo que (A.5) se satisface si

$$P_3 = -\varpi \frac{\epsilon}{2\alpha}$$

con $\varpi > 1$.

Para la desigualdad (A.6), con $P_3 = -\varpi \frac{\epsilon}{2\alpha}$

$$-\left[2\left(-\varpi \frac{\epsilon}{2\alpha}\right)a(t) + \epsilon\right] \left[2\left(l_1P_1 + l_2\left(-\varpi \frac{\epsilon}{2\alpha}\right)a(t)\right) - \epsilon\right] > \left[l_1\left(-\varpi \frac{\epsilon}{2\alpha}\right) + (l_2P_2 - P_1)a(t)\right]^2 \quad (\text{A.9})$$

por lo que

$$2l_1P_1 - l_2 \frac{\varpi\epsilon}{\alpha} a(t) - \epsilon > \frac{\left[(l_2P_2 - P_1)a(t) - l_1 \frac{\varpi\epsilon}{2\alpha}\right]^2}{\left[\epsilon\left(\frac{\varpi}{\alpha}a(t) - 1\right)\right]}$$

tal que se debe cumplir

$$2l_1P_1 > l_2 \frac{\varpi\epsilon}{\alpha} a(t) + \epsilon + \frac{\left[(l_2P_2 - P_1)a(t) - l_1 \frac{\varpi\epsilon}{2\alpha}\right]^2}{\left[\epsilon\left(\frac{\varpi}{\alpha}a(t) - 1\right)\right]}$$

tomando el peor caso del lado derecho de la desigualdad

$$2l_1P_1 > l_2 \frac{\varpi\epsilon}{\alpha} \beta + \epsilon + \frac{\left[(l_2P_2 - P_1)a(t) - l_1 \frac{\varpi\epsilon}{2\alpha}\right]^2}{\left[\epsilon(\varpi - 1)\right]}$$

y haciendo $P_1 = l_2 P_2$ y $P_2 = 1$ se tiene que

$$2l_1 l_2 > l_2 \frac{\varpi \epsilon}{\alpha} \beta + \epsilon + \frac{l_1^2 \varpi^2 \epsilon}{4\alpha^2 (\varpi - 1)}$$

$$\left(2l_1 - \frac{\varpi \epsilon}{\alpha} \beta\right) l_2 > \epsilon + \frac{l_1^2 \varpi^2 \epsilon}{4\alpha^2 (\varpi - 1)}$$

tal que

$$l_2 > \epsilon \frac{1 + \frac{l_1^2 \varpi^2}{4\alpha^2 (\varpi - 1)}}{2l_1 - \frac{\varpi \epsilon \beta}{\alpha}} \quad (\text{A.10})$$

con

$$l_1 > \frac{\varpi \epsilon \beta}{2\alpha} \quad (\text{A.11})$$

De esta forma la matriz P cumple con la positividad

$$P_1 P_2 > P_3^2$$

lo que implica que

$$l_2 > \frac{\varpi^2 \epsilon^2}{4\alpha^2}$$

lo que hace que la ganancia l_2 se elija como

$$l_2 > \max \left\{ \frac{\varpi^2 \epsilon^2}{4\alpha^2}, \epsilon \frac{1 + \frac{l_1^2 \varpi^2}{4\alpha^2 (\varpi - 1)}}{2l_1 - \frac{\varpi \epsilon \beta}{\alpha}} \right\} \quad (\text{A.12})$$

Eligiendo las ganancias l_1, l_2 conforme a (A.11) y (A.12), se tiene que la derivada de la función candidata de Lyapunov (A.3) es negativa definida.

El procedimiento para elegir las ganancias, tiene la siguiente secuencia

1. Con $\epsilon > 0, \varpi > 1$, elegir $l_1 > \frac{\varpi \epsilon \beta}{2\alpha}$
2. Elegir l_2 tal que la elección en A.12 corresponda al máximo valor
3. En la matriz $P_3 = -\varpi \frac{\epsilon}{2\alpha}$

Para la propiedad de convergencia en tiempo finito ver [Moreno11], Apéndice pp. 142 y 143.

Apéndice B

**Artículo presentado en el Congreso
Mundial del IFAC, 2011**

Time-Optimal Output Feedback Controller for Toxic Wastewater Treatment in a Fed-batch Bioreactor

Alejandro Vargas* Jaime A. Moreno** Ismael Mendoza**

* *Laboratory for Research on Advanced Processes for Water Treatment,
Instituto de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México,
Blvd. Juriquilla 3001, Querétaro 76230 Mexico
(e-mail: AVargasC@ii.unam.mx)*

** *Coord. Eléctrica y Computación, Instituto de Ingeniería,
Universidad Nacional Autónoma de México,
Ciudad Universitaria 3000, México D.F. 04630 Mexico
(e-mail: JMorenoP@ii.unam.mx, IMendozaH@ii.unam.mx)*

Abstract: Aerobic processes using sequencing fed-batch bioreactors are an effective technology to treat wastewater with toxic compounds. In order to implement optimal control schemes it is convenient to assess the biodegradation rate on-line. In this work, the dissolved oxygen concentration is used as output variable from the process to estimate this rate using a robust observer based on the generalized supertwisting algorithm. It does not require complete knowledge of the system dynamics or its parameters and is capable of estimating the biodegradation rate despite uncertainties and significant sensor and signal conditioning dynamics. The observer is then used for the implementation of a time-optimal output feedback controller that regulates the feed rate in a sequencing batch bioreactor used to treat toxic wastewater. This is tested using numerical simulations with promising results, while discussing the trade-off between allowed signal noise and convergence speed of the observer and how this affects the controller performance.

Keywords: Bio-control; higher order sliding mode; observers; water treatment

1. INTRODUCTION

Industrial wastewater often contains compounds that are difficult to degrade by conventional wastewater treatment technologies. This is mainly due to the fact that these compounds may be toxic to the consortium of microorganisms that are used to biodegrade them, such that even comparatively low concentrations may inhibit their growth and thus hinder biodegradation efficiency. Additionally, the influent concentrations of these compounds can reach very high concentrations and be highly variable in nature. For example, wastewater from the chemical and petrochemical industries may contain phenol in concentrations up to 30–50 g/L [Olguín-Lora et al., 2003]. However, sequencing batch reactor technology has proven to be a suitable alternative to cope with such difficult wastewaters [Wilderer et al., 2001]. It is characterized by its operation in well defined phases, namely: fill, react, settle, and draw, with a possible dead time before starting the next cycle.

Recent developments point to feedback control schemes that regulate the feed to the bioreactor in order to keep the biodegradation rate near its maximal value [Betancur et al., 2006]. This has successfully been tested in experimental pilot plants, showing significant improvement in performance compared to conventional (open-loop) strategies [Buitrón et al., 2005]. The variable that is used to determine the feeding regime is the *oxygen mass uptake rate* (OMUR), which is the rate at which oxygen in the

liquid phase in the bioreactor is consumed. The feed pumps are turned *on* and *off* trying to keep the OMUR at its maximum during feeding, since the OMUR is proportional to the specific biodegradation rate. This not only optimizes the time it takes to completely mineralize the substrate contained in the exchanged volume, but it also prevents inhibition of the biomass by not allowing high concentrations of substrate during the reaction phase.

The above scheme, proposed by Betancur et al. [2006], has the drawback that it estimates the OMUR by numerical differentiation of the dissolved oxygen concentration signal, but the signal conditioning of both the original measured signal and its numerical derivative lead to significant delays in the OMUR estimation. This has a negative impact with respect to the practical implementation of the controller. Furthermore, the estimation of the OMUR in that case depends on good knowledge of some model parameters.

In this paper we explore the possibility of using a robust observer to estimate the OMUR. It is designed using the generalized super-twisting algorithm, which is presented in the next section specifically for observer design. Next, the output-feedback controller design using a series connection of three generalized super-twisting observers (GSTO) for the aerobic bioreactor model is described. This includes a mathematical model description of the bioreactor, the observer design for both the reactor and the linear signal

conditioning filters, and a brief description of the controller using the OMUR as input. Following this, simulation results are presented, showing the performance of the observer and the output-feedback controller, together with a discussion on the impact of signal noise and parameter uncertainty. Finally conclusions are presented.

2. THE SUPER-TWISTING ALGORITHM

Consider a second order system given in observability form with output injection and non-necessarily vanishing, but globally bounded, perturbation terms:

$$\left. \begin{aligned} \dot{x}_1 &= f_1(y, t) + x_2 - \delta_1(x, u, t) \\ \dot{x}_2 &= f_2(y, t) - \delta_2(x, u, t) \\ y &= x_1 \end{aligned} \right\}. \quad (1)$$

Now consider the following *generalized super-twisting observer* (GSTO):

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{x}}_1 &= f_1(y, t) + \hat{x}_2 - k_1\phi_1(\hat{x}_1 - x_1) \\ \dot{\hat{x}}_2 &= f_2(y, t) - k_2\phi_2(\hat{x}_1 - x_1) \end{aligned} \right\}. \quad (2)$$

The dynamics of the estimation error $e = \hat{x} - x$ are

$$\left. \begin{aligned} \dot{e}_1 &= -k_1\phi_1(e_1) + e_2 + \delta_1(x, u, t) \\ \dot{e}_2 &= -k_2\phi_2(e_1) + \delta_2(x, u, t) \end{aligned} \right\}, \quad (3)$$

where

$$\phi_1(e_1) = |e_1|^p \cdot \psi_1(e_1) \cdot \text{sign}(e_1), \quad (4)$$

$$\phi_2(e_1) = |e_1|^{2p-1} \cdot \psi_1(e_1) \cdot \psi_2(e_1) \cdot \text{sign}(e_1), \quad (5)$$

with

$$\psi_1(e_1) = \mu_1 + \mu_2|e_1|^{q-p}, \quad (6)$$

$$\psi_2(e_2) = |e_1|^{1-p} \frac{d\phi_1}{de_1} = p\mu_1 + q\mu_2|e_1|^{q-p}, \quad (7)$$

whereby $q \geq 1 \geq p \geq \frac{1}{2}$. The error dynamics generalize the classical super-twisting algorithm [Dávila et al., 2005], which occurs when $q = 1$, $p = \frac{1}{2}$, $\mu_1 = 1$ and $\mu_2 = 0$, while one recovers a linear (Luenberger) observer if $q = 1$, $p = \frac{1}{2}$, $\mu_1 = 0$ and $\mu_2 = 1$.

Moreno [2011] has shown that for $p = \frac{1}{2}$ and $q = 1$, adequate gains $k_{1,2}$ and (and $\mu_{1,2}$) can be found such that the origin of (3) is finite-time, uniform, and practically stable, *i.e.*, all trajectories of system (3) starting in a neighborhood of the origin converge in finite time to the origin. They also converge to a neighborhood of the origin in finite time with a convergence time that is uniformly (upper) bounded with respect to the initial condition, and this happens for a family of perturbations that are non vanishing at the origin, but that are globally bounded. This is a very useful result and will be explored for estimating the reaction rate in an aerobic bioreactor. In fact, similar GSTO designs have been used for mechanical systems [Cruz-Zavala et al., 2010] and for output-feedback controller design in chemical reactor systems [Moreno et al., 2010]

3. OUTPUT-FEEDBACK CONTROLLER DESIGN

3.1 Bioreactor model

We first assume that the total biomass growth is not significant during a single batch in an aerobic bioreactor used to treat a single substrate. The consequence of this

is that biomass concentration depends only on the current volume in the bioreactor, which changes only due to the influent flow rate. Defining $w = V_0/V$, where V_0 is the initial volume and V is the current volume of mixed liquor in the fed-batch reactor, and $u = Q_{in}/V_0$, where Q_{in} is the influent flow rate, the dynamics of a fed-batch bioreactor can then be modeled using mass balances by

$$\dot{s} = [-\alpha\mu(s) + (s_{in} - s)u]w, \quad s(0) = s_0 \quad (8)$$

$$\dot{c} = -[\mu(s) + b + cu]w + (c_{sat} - c)\kappa, \quad c(0) = c_0 \quad (9)$$

$$\dot{w} = -w^2u, \quad w(0) = 1 \quad (10)$$

Here, s represents the substrate concentration, $\mu(s)$ is the specific metabolic respiration rate, while α is a constant which depends on the total biomass in the reactor and s_{in} is the substrate concentration in the influent. On the other hand, c is the dissolved oxygen (DO) concentration, c_{sat} is the DO saturation constant, b is the specific endogenous respiration rate and κ is the oxygen mass transfer rate (usually denoted as k_La). Notice that in a fed-batch reactor, w is a decreasing function and $1 \geq w \geq w_{min} = V_0/V_{max}$.

3.2 Observer design for the bioreactor

For controller and observer design purposes, we consider that the input to the system is u and the measured output is $y = c$. We define the oxygen mass uptake rate (OMUR) as the sum of μ and b , which is a quantity proportional to the specific biodegradation rate, $\alpha\mu$:

$$\rho = \mu + b, \quad \alpha\mu = \alpha(\rho - b). \quad (11)$$

A useful transformation for observer design purposes is to consider the dynamics of the normalized oxygen mass, $x_1 = (V/V_0)c = c/w$:

$$\dot{x}_1 = \frac{\dot{c}}{w} - \frac{c\dot{w}}{w^2} = -\rho + \underbrace{(c_{sat} - y)}_{f_1(y,t)} \frac{\kappa}{w}.$$

On the other hand, the dynamics of ρ may be largely unknown, but at least they are bounded, since we assume that $\mu(s)$ is bounded ($0 \leq \mu \leq \mu_{max}$) and furthermore $\frac{d\mu}{ds}$ is also assumed bounded. So therefore $\dot{\rho} = \left(\frac{d\mu}{ds}\right)\dot{s} = \delta_2(t)$, a bounded time signal. Letting $x_2 = -\rho$ we then have that

$$\left. \begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2 + f_1(y, t) \\ \dot{x}_2 &= -\delta_2(x, u, t) \\ y &= x_1w \end{aligned} \right\}. \quad (12)$$

This is precisely in the form (1), so a GSTO design is straightforward. However, the DO concentration that is measured is not truly the DO in the mixed liquor, $c(t)$, due to the inherent sensor dynamics and the necessary signal conditioning, *e.g.* to filter measurement noise. If the time constants associated with this conditioning are significant, it may become a problem for either controller or observer design. Previous results have shown that a linear second-order model is suitable for representing both the sensor and the signal conditioning dynamics [Betancur et al., 2008]:

$$\left. \begin{aligned} \tau_2\dot{z} &= c - z \\ \tau_1\dot{y} &= z - y \end{aligned} \right\}, \quad (13)$$

whereby y is the signal available for the design of the observer and z is an additional state introduced by the first filter.

3.3 A GSTO for a linear filter

Consider the following linear first order filter:

$$\tau \dot{y} = u - y, \quad (14)$$

where y is the measured signal and u is the input to the filter. We want to estimate u in order to recover the original signal before the filter, using only measurements of the filtered signal. Suppose we additionally have some information about the original signal $u(t)$, for example some idea about its dynamics:

$$\dot{u} = f_u(t) - \delta_u(t), \quad (15)$$

where $f_u(t)$ is a known signal and $\delta_u(t)$ is an unknown perturbation term.

Define the change of variable $\xi = \tau y$; then

$$\dot{\xi} = \tau \dot{y} = u - y = u - \frac{1}{\tau} \xi.$$

Now consider the estimator

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{\xi}} &= \hat{u} - y - k_1 \phi_1(e_\xi), & e_\xi &= \hat{\xi} - \tau y \\ \dot{\hat{u}} &= f_u(t) - k_2 \phi_2(e_\xi) \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

such that the estimation error $e_\xi = \hat{\xi} - \xi$, $e_u = \hat{u} - u$ has the following dynamics:

$$\left. \begin{aligned} \dot{e}_\xi &= e_u - k_1 \phi_1(e_\xi) \\ \dot{e}_u &= -k_2 \phi_2(e_\xi) + \delta_u(t) \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

This is in the form (3), so under a proper choice of $k_{1,2}$ (and $\mu_{1,2}$), finite time convergence and robustness with respect to the unknown dynamics given by δ_u is guaranteed. Note that even if the single parameter τ is not known exactly, the observer will work nevertheless; there is an additional perturbation term in the dynamics of $\hat{\xi}$ and \hat{u} will converge to $\hat{\tau}y$, but nevertheless \hat{u} will converge in finite time to u .

3.4 Series connection of estimators

The former result, together with its robustness and finite-time convergence properties, allows the series connection of several GSTO's, to be used for estimation of the OMUR in a bioreactor with filtered (and thus delayed) measurements of the dissolved oxygen concentration.

We can use them as follows:

- (1) Use a GSTO as input estimator (16) using $y(t)$ as measured signal to estimate $z(t)$, using the dynamics (13). Use the estimated dynamics of the first filter for the term f_u :

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{e}}_1 &= \hat{z} - y - k_1 \phi_{z,1}(e_1), & e_1 &= \hat{\xi}_1 - \tau_1 y, \\ \dot{\hat{z}} &= \frac{1}{\tau_2} (\hat{c} - \hat{z}) - k_2 \phi_{z,2}(e_1). \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

Note that \hat{c} , an estimate of the true DO concentration, must be used; this signal is generated by the next estimator in series. However, if the gains of the observer are chosen correctly the term may be not be needed.

- (2) Use another GSTO input estimator (16) using the previous $\hat{z}(t)$ as surrogate measured signal to estimate the signal $c(t)$. Use the estimated dynamics of the dissolved oxygen concentration for f_u :

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{\xi}}_2 &= \hat{c} - \hat{z} - k_3 \phi_{c,1}(e_2), & e_2 &= \hat{\xi}_2 - \tau_2 \hat{z}, \\ \dot{\hat{c}} &= (c_{\text{sat}} - \hat{c}) \kappa - \hat{\rho} w - \hat{c} u w - k_4 \phi_{c,2}(e_2). \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

The estimated OMUR $\hat{\rho}$ is used; this signal is generated by the next observer. Again one may simplify the design by not feeding back some terms before $k_4 \phi_{c,2}$, if the gains of the GSTO are chosen properly, *i.e.* the dynamics of $c(t)$ may be assumed completely unknown.

- (3) Finally, use another GSTO for estimating the OMUR $\rho(t)$ using $\hat{c}(t)$ as surrogate measured signal:

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{\xi}}_3 &= \hat{\xi}_4 + (c_{\text{sat}} - \hat{c}) \frac{\kappa}{w} - k_5 \phi_{\rho,1}(e_3), & e_3 &= \hat{\xi}_3 - \frac{\hat{c}}{w}, \\ \dot{\hat{\xi}}_4 &= -k_6 \phi_{\rho,2}(e_3), & \hat{\rho} &= -\hat{\xi}_4 \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

This is the GSTO that would have been designed for system (12), but using \hat{c} instead of c .

Remark 1. The error dynamics will converge to the origin in all observers with a proper choice of gains, even despite the fact that we are not using a measured signal as “input” to the observer in (19) and (20). This is because all mismatches will end up in the corresponding perturbation terms. This is no problem since the observer does not require them to be vanishing at the origin.

Remark 2. The resulting observer has 6 states, and 6 gains must be adjusted. Each of the 6 nonlinear discontinuous functions $\phi_{\{w,c,\rho\},1}$ and $\phi_{\{w,c,\rho\},2}$ may be defined by different values of corresponding p , q , μ_1 and μ_2 .

Even though the error dynamics of the system are not decoupled, because of the finite-time convergence properties, the systems will eventually become so. If one considers the first subsystem of the first two equations with sufficiently fast convergence, then after some finite time it will happen that $\tilde{z} = 0$ and thus the second subsystem will be decoupled from the first. Then $\tilde{c} = 0$ after another finite time and the third subsystem will decouple from the second, which will eventually lead to $\tilde{\rho} = 0$ also in finite time.

3.5 A time-optimal control strategy

When the substrate to be biodegraded is toxic, it becomes inhibitory at sufficiently high concentrations. This can be modeled by the function $\mu(s)$ satisfying $\mu(0) = 0$, $\lim_{s \rightarrow \infty} \mu(s) = 0$ and with a maximum μ^* at some value s^* . A time-optimal control strategy for a fed-batch bioreactor with this type of biodegradation kinetics is to start filling at the maximal flow rate available (in this case u_{max}) until $s = s^*$. Then regulate the flow rate to maintain $s(t) = s^*$ until the maximal volume is reached (in the model (8)–(10) until $w(t) = w_{\text{min}}$). Finally, stop feeding and wait until the substrate is consumed and $s(t) \leq s_{\text{min}}$.

Such a control strategy cannot be implemented without perfect parameter knowledge and measurement of the substrate concentration. Therefore other strategies are sought. If the OMUR were measured, then a control strategy could attempt to bring ρ to its the maximal attainable value, which also happens when $s = s^*$, for as long as possible (*i.e.* while $w > w_{\text{min}}$). One way to do it using event detection has been explained by Betancur et al. [2006], leading to a controller that either sets the inflow

to $u = u_{\max}$ or $u = 0$. Another possibility is extremum-seeking control [Dochain et al., 2010], but here a simpler controller is used, namely a modified PI controller with anti-windup, which considers the sign of the unmeasured signal $\mu' = \frac{d\mu}{ds}$ in the reference error calculation.

$$\left. \begin{aligned} u &= \begin{cases} k_p e + k_i \eta & \text{if } w > w_{\min} \\ 0 & \text{if } w \leq w_{\min} \end{cases} \\ e &= (\rho_{\text{ref}} - \rho) \hat{\sigma} \\ \dot{\eta} &= e - \frac{1}{\tau_{\text{aw}}} (u - \bar{u}) \\ \bar{u} &= \begin{cases} u_{\max} & \text{if } u > u_{\max} \\ u & \text{if } 0 \leq u \leq u_{\max} \\ 0 & \text{if } u < 0 \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

The signal $\hat{\sigma}$ estimates the function $\text{sign}(\mu')$, which should be positive, *i.e.* 1 when $s < s^*$ and negative, *i.e.* -1 when $s > s^*$. This signal is constructed using only the information provided by the measurement of ρ , but due to lack of space cannot be explained here; however it does require keeping track of which side of the $\mu(s)$ curve the system is currently on and detecting whether a crossing to the other side has taken place. Furthermore, the controller requires establishing correctly the setpoint as the maximal value $\rho^* = \mu^* + b$. This is done by keeping track of $\rho_{\max}(t)$, the maximal attained value of the measured ρ so far, and using as setpoint the signal $\rho_{\text{ref}} = (1 + \epsilon)\rho_{\max}$, $\epsilon > 0$. It is important to note that although the biomass is not considered explicitly in the model, it may grow slowly during the fed-batch that takes place. The controller takes care of this situation by keeping track of the maximally attained value of ρ , adapting the setpoint as needed. This only works if the rate of biomass growth is significantly lower than the rate of substrate biodegradation.

The controller can regulate the measured ρ near its setpoint thanks to the alternating negative and positive feedback of the error signal $(\rho_{\text{ref}} - \rho)$. It is not difficult to prove that the system with such a PI controller is locally stable. The output feedback controller is constructed by using the estimated $\hat{\rho}$ signal coming from the observer instead of ρ . The next section presents simulation results of such a construction. Since the GSTO converges in finite time, the controller design can be decoupled from that of the observer.

4. SIMULATION RESULTS

Both the proposed modified PI controller and the GSTO's for estimating the OMUR $\hat{\rho}$ and the true DO concentration \hat{c} from the signal conditioning and sensor model dynamics were simulated in Simulink under Matlab ver. 7.5.0 2007b. Colored noise was added to the $c(t)$ signal. The observer was tested both in open loop, *i.e.* assuming that indeed the signal $\rho(t)$ was measured from the system and used in the controller, and in closed loop, using the estimated $\hat{\rho}(t)$ as input to the controller.

The function $\mu(s)$ was implemented as a modified Haldane-law, which is a rational function of s with a single maximum at $\mu^* = \mu(s^*)$; the law, together with a graph showing its form are shown on figure 1. The parameters used for the bioreactor model are summarized in table 1.

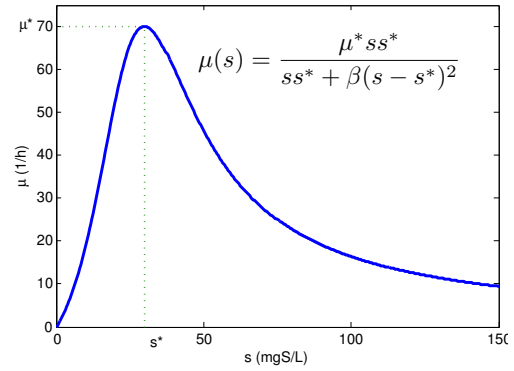


Fig. 1. Haldane law used to model $\mu(s)$; curve corresponds to the parameters of table 1.

Table 1. Parameters of the bioreactor model

Parameter	Value	Parameter	Value
s_{in}	200 mgS/L	α	1.4 mgS/mgDO
μ^*	70 h ⁻¹	s^*	30 mgS/L
β	2	κ	10 h ⁻¹
c_{sat}	6.9 mgDO/L	b	1 h ⁻¹
w_{\min}	0.4	u_{\max}	1.5 L/h
τ_1	0.03 h	τ_2	0.06 h

The GSTO and controller parameters were first calibrated in open loop, *i.e.* using the true $\rho(t)$ as input to the controller. Also, the exact knowledge of the plant parameters was assumed. In the three observers used, the same values of $p = \frac{1}{2}$ and $q = 2$ were used to ensure finite time convergence under bounded perturbations. The observers' parameters are shown in table 2. The controller's PI parameters were: $k_p = 0.35$, $T_i = 1.2$ h, $T_{\text{aw}} = 0.5$ h. These parameters were chosen according to previous experience in the tuning of the simulation model.

Table 2. Parameters of the three GSTO

Observer used for	Parameters					
	p	q	μ_1	μ_2	k_1	k_2
$z(t)$	1/2	2	1	1	10	100
$c(t)$	1/2	2	1	1	10	100
$\rho(t)$	1/2	2	1	5	40	560

4.1 Performance of the observer and the controller

In order to illustrate the advantage of using feedback control for this system, figure 2 shows the substrate concentration $s(t)$, the true OMUR $\rho(t)$ and the estimated OMUR $\hat{\rho}(t)$ when the usual SBR operational strategy (filling at maximal flowrate until $w = w_{\min}$ and then waiting until the substrate is mineralized), while figure 3 shows the same variables under the modified PI control. These two graphs were obtained simulating without added noise in the bioreactor model output. It is clear that trying to maintain the OMUR near its maximum value leads to significant savings in biodegradation time (notice the different time scales in both figures). In both cases filling starts after 0.3 h in order to pre-aerate the bioreactor and allow the observers to initially converge. Afterwards, convergence of the observers is very good, although there is the inevitable chattering effect due to the sign function. For these observers the gains of table 2 were multiplied by 10 since no noise was present and thus do not suffer from the typical noise amplification that occurs for high gain

differentiators; convergence can therefore be made very fast.

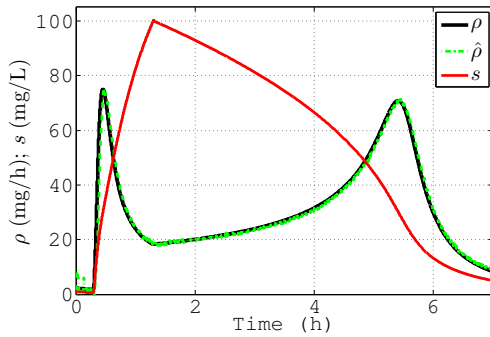


Fig. 2. Substrate and OMUR profiles under the usual SBR operational strategy

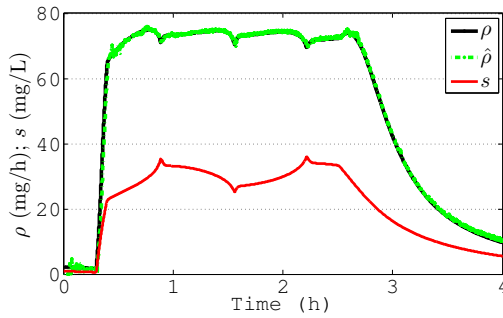


Fig. 3. Substrate and OMUR profiles under the proposed PI controller, using $\rho(t)$ to determine the flow rate $u(t)$.

Figure 4 shows the estimation of the dissolved oxygen concentration in the mixed liquor, using the proposed two GSTO in series. It is interesting to notice how despite the signal conditioning filters and the dynamics of the DO sensor, which provide a measured DO signal $y(t)$ that is significantly delayed with respect to the original one $c(t)$, the estimate $\hat{c}(t)$ of the latter is very accurate.

4.2 Performance under parameter variability

When the observer is tested with added colored noise to the signal $c(t)$ (which is partially filtered by the signal conditioning filters) and the parameters in the observers differ from those of the bioreactor, the estimates have an expected offset and additional noise, but the trend of the OMUR estimate $\hat{\rho}$ remains unaltered. This is illustrated for a $\pm 10\%$ change in the value of κ and a $\pm 5\%$ change in the value of c_{sat} on figure 5. Regarding the controller, this offset should not matter much as long as $\hat{\rho}$ remains proportional to ρ , which in turn is proportional to μ . Recall that the controller is only concerned with maintaining $\rho(t)$ near its maximally attained value. In this sense, the fact that the output injection $f_1(y, t)$ term is not canceled completely in the observers (2), does indeed alter the estimation of the OMUR, but nevertheless the signal $\hat{\rho}$

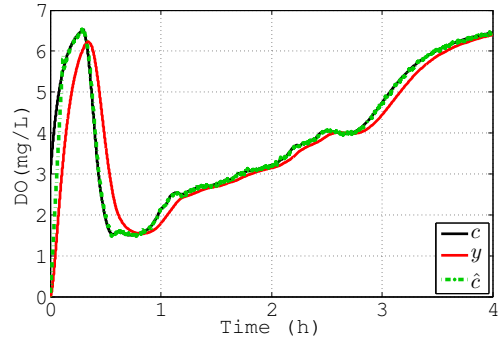


Fig. 4. Dissolved oxygen concentration profiles under feedback control: after the conditioning filters $y(t)$, within the reactor $c(t)$ and its estimate $\hat{c}(t)$.

obtained will be quite useful for output feedback control purposes.

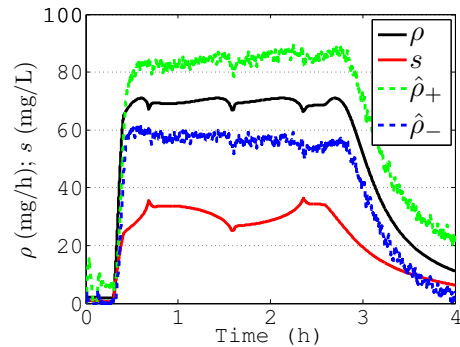


Fig. 5. Estimation of $\hat{\rho}$ when the nominal parameters are changed $\pm 10\%$ in κ and $\pm 5\%$ in c_{sat} ($\hat{\rho}_-$ and $\hat{\rho}_+$).

There exists a clear trade-off between allowed signal noise in the measurements and the speed of convergence of the observers, which is established by the gains $k_{1,2}$ and $\mu_{1,2}$. One has to sacrifice speed of convergence and thus accept a delay between the estimated $\hat{\rho}$ and the true OMUR $\rho(t)$ if the goal is to have a certain degree of immunity to noise. The GSTO performs quite well considering the fact that in essence it differentiates numerically three times.

4.3 Performance of the output feedback controller

The last test to perform under simulation is to use the estimated OMUR signal from the GSTO as input to the modified PI controller and assess its performance even with sensor measurement noise. This is shown on figure 6 for the substrate signal $s(t)$, and for the true OMUR $\rho(t)$ and its estimated value $\hat{\rho}(t)$, first with no parameter uncertainty and then with a 10% increase in the value of κ and 5% increase in the value of c_{sat} used in the observer. As can be seen, under proper calibration, the controller is capable of handling the variations in the OMUR estimate due to noise and that are amplified by the observer. With parameter mismatch the estimated OMUR does not converge to the true OMUR and the controller aims at

maximizing $\hat{\rho}$; however, the net result is nevertheless an optimization of the biodegradation rate. This is clear if the substrate concentration profiles for both simulations are compared; they remain close to the optimal value of s^* for most of the bioreaction, leading to similar durations for complete mineralization of the fed substrate.

Furthermore, figure 7 compares the input $u(t)$ to the bioreactor when the controller uses the true OMUR ρ and when it uses the estimated $\hat{\rho}(t)$ (output feedback). In the first case, the input is somewhat smooth, which is desirable since the feeding pumps would operate at a slowly changing speed throughout the filling phase. On the other hand, when the output feedback controller is used, the pumps switch *on* and *off* more often. However, if compared to the strategy proposed by [Betancur et al., 2006], at some times also the pumps operate neither completely *on* nor *off*, and under proper calibration this may lead to a better operating scheme. In any case, the OMUR and thus the biodegradation rate is kept near its optimal value throughout the fill and reaction phases, thus optimizing the duration of the bioreaction.

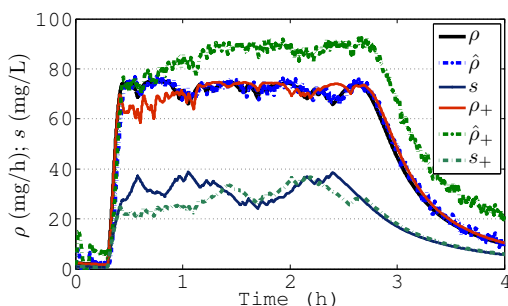


Fig. 6. Substrate profiles and true and estimated OMUR under the proposed output feedback for two simulations with different GSTO parameters.

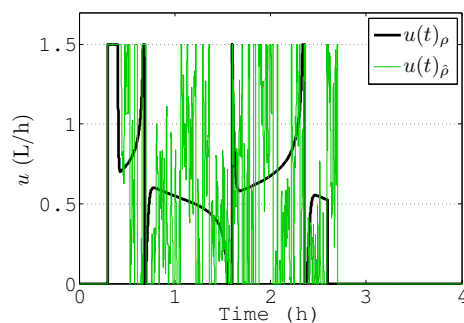


Fig. 7. Comparison of the inputs to the bioreactor when ρ or $\hat{\rho}$ are used by the controller.

5. CONCLUSION

In this paper the design of a generalized super-twisting observer, a type of second-order sliding mode observer, has been applied for the estimation of the oxygen mass

uptake rate in an aerobic fed-batch bioreactor. This signal is important because it is proportional to the specific biodegradation rate and thus can be used in a feedback controller to establish the feed rate. The coupling of the proposed observer and a modified PI controller leads to an output feedback controller that minimizes the biodegradation time in a fed-batch bioreactor used for toxic wastewater treatment by indirectly maximizing the degradation rate. The simulation results show the applicability of the design even under parameter uncertainty and point to the trade-off between adequate controller performance and measurement signal noise.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work was supported in part by DGAPA-UNAM projects IN106209 and IN117610, project CONACYT 51244 and by a CONACYT scholarship for I. Mendoza.

REFERENCES

- M.J. Betancur, J.A. Moreno, I. Moreno-Andrade, and G. Buitrón. Practical optimal control of fed-batch bioreactors for the waste water treatment. *Int. J. Robust and Nonlinear Control*, 16(3):173–190, 2006.
- M.J. Betancur, I. Moreno-Andrade, J.A. Moreno, G. Buitrón, and D. Dochain. Modeling for the optimal biodegradation of toxic wastewater in a discontinuous reactor. *Bioproc. Biosyst. Eng.*, 31:307–313, 2008.
- G. Buitrón, M.-E. Schoeb, I. Moreno-Andrade, and J. Moreno. Comparison of two control strategies for an automated sequencing batch reactor under extreme peaks of 4-chlorophenol. *Wat. Res.*, 39(6):1015–1024, 2005.
- E. Cruz-Zavala, J.A. Moreno, and L. Fridman. Uniform second-order sliding mode observer for mechanical systems. In *Proc. 11th Int. Workshop on Variable Structure Systems $\dot{\nu}_{\frac{1}{2}}$ VSS 2010*, Mexico City, Mexico, June 26-28 2010.
- J. Dávila, L. Fridman, and A. Levant. Second-order sliding-modes observer for mechanical systems. *IEEE Trans. Automatic Control*, 50(11):1785–1789, 2005.
- D. Dochain, M. Perrier, and M. Guay. Extremum seeking control and its application to process and reaction systems. A survey. *Math. Comput. Simul.*, 2010. (in press).
- J.A. Moreno. Lyapunov approach for analysis and design of second order sliding mode algorithms. In L. Fridman, J.A. Moreno, and R. Iriarte, editors, *Sliding Modes After the First Decade of the 21st Century*. 2011. (to appear in 2011).
- J.A. Moreno, J. Álvarez, E. Rocha-Cózatl, and J. Díaz-Salgado. Super-twisting observer-based output feedback control of a class of continuous exothermic chemical reactors. In *Proceedings of the 2010 IFAC 9th International Symposium on Dynamics and Control of Process Systems, DYCOPS 2010*, pages 307–313, Leuven, Belgium, July 5-7 2010.
- P. Olguín-Lora, I. Puig-Grajales, and E. Razo-Flores. Photochemical elimination of phenols and COD in industrial wastewaters. *Environ. Technol.*, 79:999–1006, 2003.
- P.A. Wilderer, R.L. Irvine, and M.C. Goronszy. *Sequencing Batch Reactor Technology*, volume 10 of *Scientific and Technical Reports*. IWA Publishing, London, 2001.

Apéndice C

**Artículo presentado en el Congreso
Anual del AMCA, 2011**

Estimación de tasa de reacción en bioprocesos con observadores tipo super-twisting

Ismael Mendoza Jaime A. Moreno

Coordinación Eléctrica y Computación, Instituto de Ingeniería,
Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 México D.F., Mexico
Email: imendozah@iingen.unam.mx, JMorenoP@ii.unam.mx

Resumen—En este trabajo se presenta como estimar la tasas de reacción en bioprocesos con observadores tipo super-twisting, dados diferentes grados de conocimiento de las tasas de reacción. Las condiciones de existencia del Observador Asintótico (AO) son suficientes para que se puede estimar cada una de las tasas de reacción involucradas en el proceso. Los resultados muestran que es posible mejorar los resultados de estimación de las tasas de reacción dados por observadores de alta ganancia (OAG), tanto en el caso ideal como en el caso en el que se tenga ruido en las mediciones.

Palabras clave: Observadores, modos deslizantes, bioprocesos.

I. INTRODUCCIÓN

Los procesos biotecnológicos han evolucionado de forma significativa durante las últimas décadas, con requerimientos cada vez más exigentes relacionados a su industrialización y a la creación de nuevos productos. Un problema central en el área, es la falta de instrumentación para implementar técnicas de control en tiempo real que mejoren las condiciones en las que se lleva a cabo los procesos en general.

Por otra parte, el conocimiento que se tiene acerca de las tasas de reacción, las cuales cuantifican la actividad biológica en el proceso es pobre, debido a la complejidad de este tipo de sistemas y a los múltiples factores que las afectan.

Razón por la que hay un interés marcado en desarrollar esquemas de observación en el que la estimación no dependa de un conocimiento detallado del modelo. Es decir, se buscan esquemas de observación que incluyan sólo las partes bien conocidas (parte hidráulica en un reactor), evitando las partes mal conocidas (generalmente las cinéticas de reacción) en el diseño del observador.

Dentro de la clase de observadores que evitan el modelado de la tasa de reacción los hay con dos propósitos:

- Observadores de estado (concentraciones no medibles del proceso)
- Estimadores para tasas de reacción (o parámetros asociados a éstas)

Para la primera clase, observadores que estiman estados, la aproximación más conocida es el llamado “Observador Asintótico” (OA) reportado en (Dochain, 2008). El OA permite la estimación de los estados sin conocimiento alguno de las tasas de reacción, realizando un combinación lineal de los estados medibles y no medibles del sistema;

pero esto tiene un costo: no se tiene ningún grado de libertad en el diseño del observador tal que su convergencia está dada por las condiciones experimentales en las que se desarrolla el proceso.

En la segunda clase, observadores que permiten obtener un estimado de las tasas de reacción, la aproximación más conocida son los Observadores de Alta Ganancia (OAG), reportados en (Farza *et al.*, 1998; Farza *et al.*, 2000; Sesteanu *et al.*, 2009). En la que los OAG son aplicados para reconstruir tasas de reacción, o bien estimar parámetros contenidos en ellas.

En el presente trabajo se plantea como objetivo principal estimar las tasas de reacción en bioprocesos, mediante el uso de observadores GSTO (Generalized Super-Twisting Observer). Las condiciones para obtener los estimados de la tasa de reacción son muy poco restrictivas, sólo es necesario conocer una cota de la derivada de las tasas de reacción, sin necesidad de un modelo detallado para efectos del diseño del observador. Cuando se tiene un conocimiento mínimo de las tasas de reacción, éste se puede incorporar al diseño del observador dando lugar a diferentes variantes, una de las cuales permite aplicar una nueva clase de estimadores de parámetros en tiempo finito (Guzmán, 2011).

Como utilidad inmediata del hecho de obtener un estimado de la tasa de reacción, o de algunos de los parámetros que incluye; se explora la posibilidad de utilizarlos para a su vez estimar los estados no medidos del sistema, siempre y cuando sea posible.

II. OBSERVADORES GSTO

El Algoritmo Super-Twisting (STA) inicialmente desarrollado para propósitos de control, ha sido utilizado también para el diseño de diferenciadores y observadores robustos. En (Moreno y Osorio, 2008) el STA se extendió para tratar con una clase de perturbaciones más amplia mediante la adición de términos lineales.

Posteriormente se reportó un algoritmo genérico en (Moreno, 2011); en el cual se basa este trabajo. Y que para efectos de observación, se puede explicar considerando el siguiente sistema de segundo orden dado en forma de observabilidad:

$$\left. \begin{aligned} \dot{x}_1 &= f_1(y, u, t) + x_2 - \delta_1(x, u, t) \\ \dot{x}_2 &= f_2(y, u, t) - \delta_2(x, u, t) \\ y &= x_1 \end{aligned} \right\}. \quad (1)$$

donde x_1, x_2 son las variables de estado a ser estimadas, $f_1(y, u, t), f_2(y, u, t)$ son funciones conocidas, y $\delta_1(x, u, t), \delta_2(x, u, t)$ son términos de perturbación desconocidos globalmente acotados. Ahora, considerando el siguiente observador, al cual denominaremos como “*observador super-twisting generalizado*” (GSTO por sus siglas en inglés), el cual está dado por:

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{x}}_1 &= f_1(y, u, t) + \hat{x}_2 - l_1\phi_1(\hat{x}_1 - x_1) \\ \dot{\hat{x}}_2 &= f_2(y, u, t) - l_2\phi_2(\hat{x}_1 - x_1) \end{aligned} \right\}. \quad (2)$$

donde \hat{x}_i , $i = 1, 2$, son variables escalares a ser estimadas, y l_i son ganancias positivas a ser diseñadas. Definiendo al error como $e = \hat{x} - x$ y las no linealidades ϕ_1, ϕ_2 dadas por (Moreno, 2011):

$$\left. \begin{aligned} \phi_1(e_1) &= m_1|e_1|^p \text{sign}(e_1) + m_2|e_1|^q \text{sign}(e_1) \\ \phi_2(e_1) &= m_1^2 p |e_1|^{2p-1} \text{sign}(e_1) + m_2^2 q |e_1|^{2q-1} \text{sign}(e_1) \\ &\quad + m_1 m_2 (p+q) |e_1|^{p+q-1} \text{sign}(e_1) \end{aligned} \right\}. \quad (3)$$

donde $m_1, m_2 \geq 0$ son dos constantes no-negativas y $q \geq 1 \geq p \geq \frac{1}{2}$ son números reales. La dinámica del error de observación está dada por

$$\left. \begin{aligned} \dot{e}_1 &= -l_1\phi_1(e_1) + e_2 + \delta_1(x, u, t) \\ \dot{e}_2 &= -l_2\phi_2(e_1) + \delta_2(x, u, t) \end{aligned} \right\}. \quad (4)$$

la cual corresponde al llamado “Algoritmo Genérico de Segundo Orden” (GSOA por sus siglas en inglés). El observador GSTO (2), tiene en total cuatro parámetros a diseñar, (p, q, m_1, m_2) y dos valores de ganancias (l_1, l_2) para los términos de corrección. Con la combinación de diferentes valores para m_1, m_2, p, q se recobran casos particulares de gran importancia, tales como: un algoritmo lineal con $m_1 = 0, q = 1$; STA-clásico con $m_2 = 0, p = 1/2$.

En particular aquí nos interesa el caso en el que el sistema (1) toma la forma:

$$\dot{x}_1 = f_1(y, u, t) - \delta_1(x, u, t) \quad (5)$$

donde para poder reconstruir la perturbación $\delta_1(x, u, t)$, se deben cumplir las siguientes condiciones

- Grado relativo 1 de x_1 con respecto a $\delta_1(x, u, t)$
- La derivada de la perturbación es acotada, i.e. se cumple que

$$-c \leq \dot{\delta}_1(x, u, t) \leq c$$

donde c es una constante.

Para estimar el estado y reconstruir la perturbación en (5), considere el siguiente GSTO:

$$\left. \begin{aligned} \dot{\hat{x}}_1 &= -l_1\phi_1(\hat{x}_1 - x_1) + f_1(y, u, t) - \hat{\delta}_1 \\ \dot{\hat{\delta}}_1 &= -l_2\phi_2(\hat{x}_1 - x_1) \end{aligned} \right\}. \quad (6)$$

donde se considera a la derivada de la perturbación como una dinámica extendida del sistema (5), y definiendo el error como $\tilde{x}_1 = \hat{x}_1 - x_1$, tal que

$$\left. \begin{aligned} \dot{\tilde{x}}_1 &= -l_1\phi_1(\tilde{x}_1 - x_1) - \hat{\delta}_1 + \delta_1 \\ \dot{\tilde{\delta}}_1 &= -l_2\phi_2(\tilde{x}_1 - x_1) + \dot{\delta}_1 \end{aligned} \right\}. \quad (7)$$

En (7) se puede ver explícitamente la compensación de la señal de error permite dos cosas: la estimación estado x_1 y a su vez la reconstrucción de la perturbación δ_1 , ambas de forma exacta y en tiempo finito.

III. SÍNTESIS DE GSTO APLICADOS A BIOPROCESOS

En esta sección se realiza una síntesis de la aplicación de observadores GSTO para estimar todas y cada una de las tasas de reacción utilizando el modelo general para bioprocesos (Bastin G., 1990; Dochain, 2008), el cual se obtiene mediante un balance de masas y esquema de reacciones, su forma vectorial está dada por:

$$\dot{\xi} = K\varphi(\xi, t) - D\xi - Q(\xi) + F \quad (8)$$

donde $\xi \in \mathbb{R}^n$ es el estado que representa la concentración de componentes, $K \in \mathbb{R}^{n \times q}$ es la matriz de coeficientes de producción, $\varphi \in \mathbb{R}^q$ es el vector de tasas reacción, D es la matriz de tasas de dilución, Q es el vector de tasas de salida y F es el vector de tasas de alimentación. Nótese que ξ_i representa la i -ésima componente de $\xi \in \mathbb{R}^n$.

Realizando una partición del sistema en estados medibles ξ^a , y estado no medibles ξ^b

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi^a \\ \xi^b \end{pmatrix} \quad (9)$$

con la correspondiente partición de las matrices y vectores; y donde se considera a las tasas de reacción φ como una cantidad desconocida en el modelo (8). Entonces es posible estimar todas y cada una de las tasas de reacción y a su vez estimar todos los estados cuando las condiciones de existencia de un AO se satisfacen:

- K, Q, F y D son conocidos
- El número de variables de estado conocidas m es igual o mayor que el rango de de la matriz K , es decir

$$m = \dim(\xi^a) \geq q = \text{rank}(K) = \text{rank}(K^a)$$

- La matriz K^a es invertible

Tomando el modelo reducido de estados conocidos ξ^a , y definiendo

$$y = (K^a)^{-1}\xi^a \quad (10)$$

y tomando a las derivadas de las tasas de reacción como dinámicas extendidas, se tiene

$$\left. \begin{aligned} \dot{y} &= \varphi(t) - (K^a)^{-1}(D^a\xi^a + Q^a - F^a) \\ \dot{\varphi} &= \Delta \end{aligned} \right\}. \quad (11)$$

donde $\Delta = [\dot{\varphi}_1, \dots, \dot{\varphi}_q]^T$. El modelo (11) cumple las siguientes condiciones

- Grado relativo 1 de y_i respecto a φ_i
- $|\varphi_i| \leq \epsilon$, $\epsilon \doteq$ constante

En modelos de bioprocesos la condición de grado relativo se cumple por las propiedades en la estructura de las dinámicas de las concentraciones de componentes dentro de un biorreactor. La segunda condición, el hecho de que la velocidad de cambio de las tasas de reacción se asuma

como acotada es conforme a la práctica; puesto que las tasas de reacción en un bioproceso no cambian de forma abrupta.

Por lo que es posible estimar a ξ^a y a φ con el siguiente observador

$$\begin{aligned}\dot{\hat{y}} &= -L_1\Phi_1(\tilde{\xi}^a) + \hat{\varphi} - K^{a,-1}(D^a\xi^a - Q^a + F^a) \\ \dot{\hat{\varphi}} &= -L_2\Phi_2(\tilde{\xi}^a)\end{aligned}$$

definiendo el error como $\tilde{y} = \hat{y} - y$ and $\tilde{\varphi} = \hat{\varphi} - \varphi$. Tal que las dinámicas del error de observación son

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{y}} &= -L_1\Phi_1(\tilde{\xi}^a) + \tilde{\varphi} \\ \dot{\tilde{\varphi}} &= -L_2\Phi_2(\tilde{\xi}^a) - \Delta\end{aligned}$$

donde

$$L_1 = \text{diag}[l_{1,\xi_1^a}, \dots, l_{1,\xi_m^a}]$$

$$L_2 = \text{diag}[l_{2,\xi_1^a}, \dots, l_{2,\xi_m^a}]$$

y

$$\Phi_1(\tilde{\xi}^a) = \begin{bmatrix} \phi_1(\tilde{\xi}_1^a) \\ \vdots \\ \phi_1(\tilde{\xi}_m^a) \end{bmatrix}, \quad \Phi_2(\tilde{\xi}^a) = \begin{bmatrix} \phi_2(\tilde{\xi}_1^a) \\ \vdots \\ \phi_2(\tilde{\xi}_m^a) \end{bmatrix}$$

con $p \geq 1/2, q \geq 1, m_{1,\xi_i^a}, m_{2,\xi_i^a} > 0$, y cada función $\phi_1(\tilde{\xi}_i^a), \phi_2(\tilde{\xi}_i^a)$, para $i = [1, \dots, m]$ están dadas por

$$\begin{aligned}\phi_1(\tilde{\xi}_i^a) &= m_{1,\xi_i^a} |\tilde{\xi}_i^a|^p \text{sign}(\tilde{\xi}_i^a) + m_{2,\xi_i^a} |\tilde{\xi}_i^a|^q \text{sign}(\tilde{\xi}_i^a) \\ \phi_2(\tilde{\xi}_i^a) &= pm_{1,\xi_i^a}^2 |\tilde{\xi}_i^a|^{2p-1} \text{sign}(\tilde{\xi}_i^a) \\ &\quad + m_{2,\xi_i^a}^2 q |\tilde{\xi}_i^a|^{2q-1} \text{sign}(\tilde{\xi}_i^a) \\ &\quad + (p+q)m_{1,\xi_i^a} m_{2,\xi_i^a} |\tilde{\xi}_i^a|^{p+q-1} \text{sign}(\tilde{\xi}_i^a)\end{aligned}$$

Para obtener un estimado de los estados medibles ξ^a , basta con realizar

$$\hat{\xi}^a = K^a \hat{y}$$

Tal que se tiene el Algoritmo Genérico de Segundo Orden (GSOA) en la dinámica del error para cada término. La razón de construir un observador para estimar cada tasa de reacción radica en que frecuentemente las derivadas de las tasas de reacción a estimar no están en valores cercanos. Si no es el caso se puede realizar la la calibración con un sólo juego de parámetros y ganancias como lo propuesto en (Farza *et al.*, 1998).

IV. CASO DE ESTUDIO: FITOPLANCTON MARINO

En esta sección se presenta un caso de estudio y a través de su desarrollo se muestran las diferentes posibilidades y variaciones para obtener un estimado de las tasas de reacción, y en un segundo caso la estimación de las variables de estado no medidas.

En el caso de la estimación de las tasas de reacción, los resultados son comparados con observadores de alta ganancia (OAG) y con el observador asintótico (OA) para el caso de la estimación de estados

TABLA I

CONDICIONES INICIALES Y VALORES DE PARÁMETROS EN EL MODELO

C.I. Modelo	Valores de param.
$S(0) = 10(\mu\text{mol N.L}^{-1})$	$\rho_m = 0,5(\mu \text{ molN.molC}^{-1}.\text{d}^{-1})$ $K_S = 0,43(\mu \text{ M N})$ $K_L = 6,59(\text{n.d})$
$N(0) = 0,3(\mu\text{mol N.L}^{-1})$	$K_C = 33(\mu \text{ mol quanta.m}^{-2}.\text{s}^{-1})$ $\alpha = 24,1(\text{d}^{-1})$
$L(0) = 10(\mu\text{mol N.L}^{-1})$	$K_I = 208,5(\mu \text{ mol quanta.m}^{-2}.\text{s}^{-1})$ $\lambda = 0,054(\text{d}^{-1})$
$C(0) = 50(\mu\text{mol C.L}^{-1})$	$\beta = 0,345(\text{d}^{-1})$ $S_{in} = 40(\mu\text{mol N.L}^{-1})$

El modelo simplificado que representa el crecimiento de fitoplancton marino reportado en (Pawlowski, 2002), está dado por

$$\Sigma_P \begin{cases} \dot{S} = -\rho_m \frac{S}{S+K_s} C + D[S_{in} - S] \\ \dot{N} = \rho_m \frac{S}{S+K_s} C - \gamma(I)N \frac{L}{C} - DN + \beta L \\ \dot{L} = \gamma(I)N \frac{L}{C} - DL - \beta L \\ \dot{C} = a(I)L - DC - \lambda C \end{cases} \quad (12)$$

donde S es la fuente de nitrógeno, N consorcio celular de nitrógeno, L proteínas clorofílicas y C carbono particular; D es la tasa de dilución (escalar), S_{in} fuente de nitrato, λ es un factor en el término de tasa de respiración, β es un coeficiente en el término de tasa de degradación de clorofila; finalmente I es la intensidad luminosa, $a(I)$ es la tasa de fotosíntesis, $\gamma(I)$ es la síntesis de proteínas; considere que $a(I)$ y $\gamma(I)$ están descritos como

$$a(I) = \frac{\alpha I}{k_I + I} \quad (13)$$

$$\gamma(I) = a(I) \frac{K_L K_C}{K_C + I} \quad (14)$$

Para propósitos de simulación se tomó en cuenta un periodo de 25 días, la tasa de dilución es nula en los primeros 3 días (periodo de lote), después es puesta a un valor constante $d = 0,4[\text{d}^{-1}]$. La intensidad luminosa es variante en el tiempo siguiendo periodos día-noche, y para los últimos días $19[d]$ a $25[d]$ es puesta a un valor constante. Los parámetros y condiciones iniciales del modelo son mostrados en la tabla (I).

Los escenarios que a continuación se presentan, corresponden a objetivos de observación con diferentes variaciones y diferentes suposiciones acerca de que se conoce en el modelo (12). Para cada uno de estos casos se muestran resultados cuando las mediciones están libres de ruido y en presencia de ruido blanco gaussiano. En el caso de mediciones con ruido, a los datos de (L, C) se les suma ruido blanco con una amplitud del 5% del valor de cada señal.

TABLA II
PARÁMETROS DE LOS OBSERVADORES

Observador usado para	Parámetros			
	m_1	m_2	l_1	l_2
\hat{a}, \hat{I}	4	1	6	1
\hat{N}	8	2	1	2

IV-A. Escenario 1: estimación de tasa de reacción

Escenario [1]: Suponiendo que en (12) el estado medido es (C, L) ; considerando que la tasa de reacción $(a(I))$ es desconocida. El objetivo es estimar la tasa de fotosíntesis $a(I)$.

Primero, aplicamos un observador GSTO para estimar la tasa de fotosíntesis. Considerando la dinámica de carbón particular del modelo (12), tenemos el siguiente sistema extendido

$$\Sigma_{P,1} \begin{cases} \dot{C} = -(D + \lambda)C + \varphi \\ \dot{\varphi} = \delta(t) \end{cases}$$

donde $\varphi = a(I)L$ es considerado como una dinámica extendida, por lo que el GSTO está dado por

$$\Sigma_{\Omega,1} \begin{cases} \dot{\hat{C}} = -l_1\phi_1(\tilde{C}) - (D + \lambda)C + \hat{\varphi} \\ \dot{\hat{\varphi}} = -l_2\phi_2(\tilde{C}) \end{cases}$$

donde la definición del error está dada por $\tilde{C} = \hat{C} - C$ y $\tilde{\varphi} = \hat{\varphi} - \varphi$, tal que un estimado de la tasa de fotosíntesis es obtenida mediante

$$\hat{a}(I) = \frac{\hat{\varphi}}{L} \quad (15)$$

Se debe notar que en el diseño del observador se utiliza información mínima del término de tasa de reacción (φ) para reconstruirlo, y aunque el estado L es medido es utilizado solamente para recobrar un estimado de $a(I)$.

En este caso el estimado de $a(I)$ obtenido por la relación (15), se compara con un observador de alta ganancia dado por

$$\Omega_{HG} \begin{cases} \dot{\hat{C}} = -(D + \lambda)C + \hat{a}L - 2\theta L[\hat{C} - C] \\ \dot{\hat{a}} = -\theta^2 L[\hat{C} - C] \end{cases} \quad (16)$$

donde la ganancia es puesta $\theta = 7$.

Los parámetros y ganancias para el observador $\Sigma_{\Omega,1}$ son mostrados en la Tabla (II). Para el caso en el que las medidas son consideradas libres de ruido, Figuras (1,2), es importante notar la diferencia en el tipo de convergencia de ambos observadores puesto que en el caso del GSTO la convergencia se da en tiempo finito y de manera exacta; mientras que en el OAG el error de estimación permanece acotado en una región cercana al origen. Es sabido que en el caso de OAG la ganancia θ puede ser incrementada arbitrariamente hasta que la región que acota al error sea tan pequeña como uno quiera. Pero en el caso de mediciones con ruido se debe tener presente el compromiso entre velocidad de convergencia y rechazo a ruido

Obviamente esto también aplica al caso de los observadores GSTO, pero la selección de ganancias y principalmente

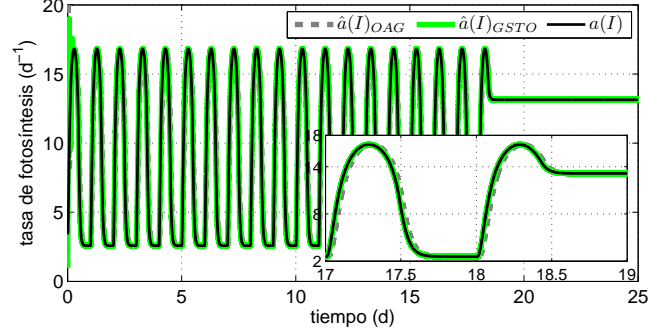


Figura 1. Estimación de tasa de fotosíntesis \hat{a} , verde GSTO, gris OAG

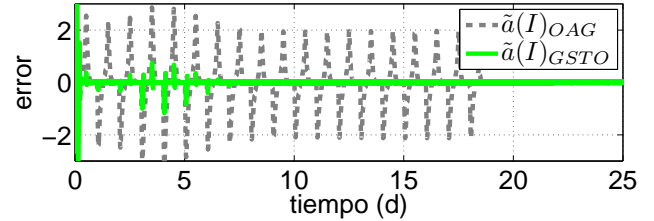


Figura 2. Error en estimación de \hat{a} verde GSTO, gris OAG

de los parámetros hacen esta configuración más flexible de tal forma que se puede obtener una buena velocidad de convergencia y un rechazo al ruido mejor que en el caso de observadores de alta ganancia. La razón principal de este hecho es la posibilidad de configurar y/o balancear las ganancias de los términos que contiene el GSOA.

Los resultados en presencia de ruido son reportados en la Figura (3), donde se puede apreciar que en el caso de la reconstrucción de a los resultados muestran un menor desviación en el error y un mejor rechazo al ruido del observador GSTO. En el caso de los ciclos noche-día para la intensidad luminosa, la estimación del GSTO es capaz de reconstruir la señal a con menos error en magnitud que el OAG. Lo mismo es cierto para el periodo en el que la luz es constante, entre los días $17[d] - 20[d]$, donde se puede apreciar claramente que el rechazo de ruido es mejorado.

IV-B. Escenario 2: estimación de $I, \gamma(I), N$

Escenario [2]. En esta parte se considera como medible L, C, S y el estimado \hat{a} obtenido de (15), después se obtiene un estimado de la intensidad luminosa; posteriormente, el estimado de la intensidad luminosa es utilizado para evaluar la síntesis de proteínas (14). Finalmente de (12), la dinámica del consorcio celular de nitrógeno es considerada para obtener su estimado.

En este escenario es necesario suponer funciones analíticas para las tasas de fotosíntesis y la síntesis de proteínas y además considerar que sus parámetros son conocidos; se resalta el hecho de que la intensidad luminosa es considerada como desconocida. Entonces, la intensidad luminosa

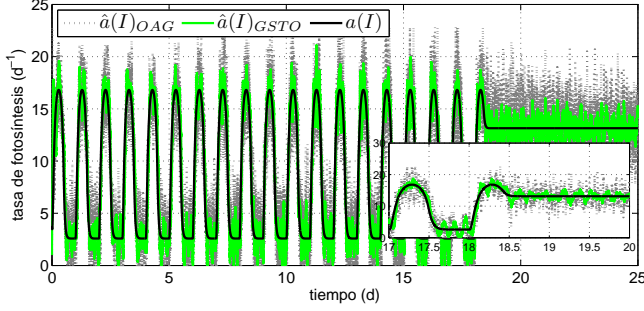


Figura 3. Estimación de tasa de fotosíntesis \hat{a} , en presencia de ruido

puede obtenerse de (13), y queda dada por la relación

$$\hat{I} = \frac{K_I \hat{a}}{\alpha - \hat{a}} \quad (17)$$

donde \hat{a} es dado por el observador GSTO previo. Ahora, por medio de \hat{a} y \hat{I} la tasa de síntesis de proteínas puede obtenerse como

$$\gamma(\hat{I}) = \hat{a} \frac{K_L K_C}{K_C + \hat{I}} \quad (18)$$

para evitar las singularidades en (17), \hat{a} es saturado a 95% de su máximo valor que es α . Hasta el momento se tiene un estimado de la intensidad luminosa.

Finalmente, para estimar el estado N de (12) consideramos la dinámica del nitrógeno

$$\dot{N} = \rho_m \frac{S}{S + K_s} C - \gamma(I) N \frac{L}{C} - DN + \beta L$$

tal que el observador correspondiente está dado por

$$\dot{\hat{N}} = \rho_m \frac{S}{S + K_s} C - \gamma(\hat{I}) \hat{N} \frac{L}{C} - D \hat{N} + \beta L \quad (19)$$

donde $\gamma(\hat{I})$ es dada por (18) y es considerado como medible; y el error es definido como $\tilde{N} = \hat{N} - N$, tal que la dinámica del error está dada por

$$\dot{\tilde{N}} = -[\hat{\gamma} \hat{N} - \gamma N] \frac{L}{C} - d[\hat{N} - N]$$

Los resultados de (19) se muestran junto con los resultados de los siguientes escenarios en las Figuras (4,5) para ambos: con y sin ruido en las medidas de (L, C) .

IV-C. Escenario [3]: Estimador de parámetros en tiempo finito para N

Existe otra posibilidad para estimar el estado N , en lugar de usar (19). En este escenario la estimación de N se realiza con un estimador de parámetros en tiempo finito (Guzmán, 2011). Para hacer esto, se asume que sólo (L, C) es medido. De (12) se toma en cuenta la dinámica L , tal que se tiene el sistema extendido

$$\Sigma_{P,3} \begin{cases} \dot{L} = \gamma(I) \frac{L}{C} N - dL - \beta L \\ \dot{N} = \delta_2(t) \end{cases} \quad (20)$$

donde $\gamma(I) \frac{L}{C}$ es considerado como el regresor y es conocido, y el estado no medido N es considerado como un

parámetro variante en el tiempo. Por lo que se tiene el siguiente estimador de parámetros en tiempo finito

$$\Omega_{P,3} \begin{cases} \dot{\hat{L}} = \gamma(\hat{I}) \frac{L}{C} \hat{N} - d\hat{L} - \beta\hat{L} - l_1 \phi_1(\tilde{L}) \\ \dot{\hat{N}} = -l_2 \phi_2(\tilde{L}) \gamma(\hat{I}) \frac{L}{C} \end{cases} \quad (21)$$

donde la definición del error es $\tilde{L} = \hat{L} - L$. Se debe notar que en (21), para reconstruir el regresor la síntesis de proteína $\gamma(I)$ es considerada como medible. Esta consideración es hecha, debido a que en el escenario anterior un estimado de la síntesis de proteínas fue obtenida (18). En este caso, no es necesario medir la fuente de substrato S para estimar el estado N . Los resultados son mostrados en las Figuras (4,5) y se discuten más adelante.

IV-D. Escenario [4]: OA para estimación de N

Escenario [4]: Finalmente, consideramos un OA para estimar el consorcio celular de nitrógeno, para hacer es necesario suponer que (L, C, S) es medido. Asumir que ningún conocimiento de las tasas de reacción $a(I)$ y $\gamma(I)$. Entonces, definiendo la variable auxiliar $\zeta = N + L$, tal que

$$\dot{\zeta} = -D\zeta + \rho_m \frac{S}{S + K_s} C$$

y el OA dado por

$$\dot{\hat{\zeta}} = -D\hat{\zeta} + \rho_m \frac{S}{S + K_s} C$$

tal que tenemos en la dinámica del error

$$\dot{\tilde{\zeta}} = -D\tilde{\zeta}$$

considerando que la tasa de dilución (D) cumple la condición de excitación persistente; entonces, un estimado del nitrógeno está dado por

$$\hat{N}_{AO} = \hat{\zeta} - L \quad (22)$$

Es OA es capaz de estimar los estados no medidos evitando el conocimiento de la tasa de reacción, pero la velocidad de convergencia no es asignable y es tal que depende de las condiciones en las que se lleve a cabo el proceso. En este caso, la velocidad de convergencia depende de la tasa de dilución (D). Los resultados de (22) son reportados en las Figuras (4,5) y discutidas en la siguiente sección.

IV-E. Resultados para la estimación de N

En esta sección se muestran las variaciones para estimar N . Estas variaciones corresponden a los observadores (19,21,22). Las condiciones iniciales son las mismas para los tres observadores.

Es importante notar el hecho de la velocidad de convergencia para el observador (21) y su rechazo al ruido, esto es debido a que la dinámica de N es considerada y es tal que provee el rechazo al ruido en altas frecuencias. Por el contrario, en el caso del (22) el ruido sumado a L pasa a través de la relación algebraica sin ninguna afectación. Hay que recordar que para los primeros 3 días el reactor funciona en modo de lote, esta es la causa por la cual el OA tiene

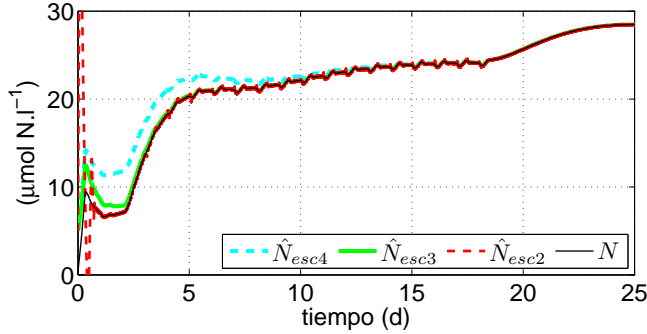


Figura 4. Estimación de N sin ruido, tres variantes

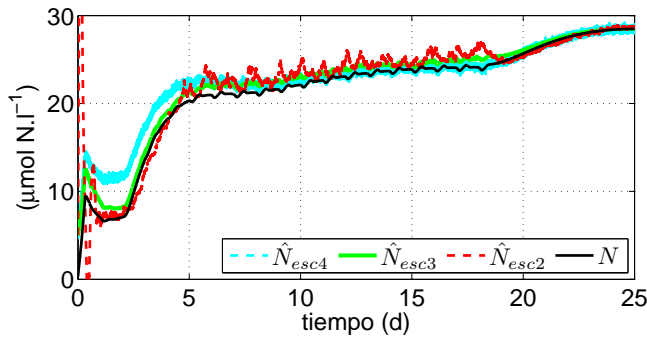


Figura 5. Estimación de N con ruido en las mediciones

un error constante (bias) en el comienzo de la simulación. Para el observador del escenario 3, la estimación de N es mucho más sensible al ruido pero la convergencia es más rápida que los otros dos observadores.

En el caso general de (19), i.e. cuando para construir el observador se toma la dinámica del estado no medido y se provee la tasa de reacción estimada, no siempre es posible obtener un mejor velocidad de convergencia en comparación con un OA. Puesto que la mayor parte de las veces el término correspondiente a la tasa de reacción en la dinámica del error es despreciable en magnitud, lo cual provoca que la velocidad en la convergencia sea muy similar a la del OA.

Lo que sí hay que resaltar es que el hecho de utilizar la dinámica del modelo dará un mejor rechazo a ruido (comparado con un OA) debido las componentes de altas frecuencias serán atenuadas por las propiedades estructurales del modelo.

V. CONCLUSIONES

Las características únicas del GSTO como insensibilidad ante perturbaciones, exactitud, convergencia en tiempo finito y uniformidad con respecto a condiciones iniciales, hacen de ellos una herramienta muy atractiva para tratar con modelos que contienen incertidumbres. Y dadas las condiciones, como en el caso de bioprocesos, se puede reconstruir inclusive a la perturbación.

Al observador GSTO se le puede ver como un observador de ganancia variable; puesto que en (3) con $q \geq 1 \geq$

$p \geq \frac{1}{2}$ se poseen dos clases de términos estabilizantes, de alto y bajo orden. Los términos de corrección alto orden proveen al algoritmo de mayor fuerza de atracción cuando las trayectorias están muy alejadas del punto de equilibrio. En contraparte, los términos de bajo orden proveen la convergencia en tiempo finito, y atraen las trayectorias del sistema con mayor fuerza (en comparación con los términos de alto orden) cuando se encuentran cercanas al origen. Esta característica permite obtener una mayor velocidad de convergencia y una robustez mejorada en comparación de los OAG. El ajuste de ganancias y parámetros en el GSTO se puede establecer conociendo una cota para las tasas de reacción como lo establecido en (Moreno, 2011).

Estimar las tasas de reacción deja posibilidades abiertas para ensayar nuevos esquemas de control en bioprocesos. Una utilidad inmediata de obtener un estimado de la tasa de reacción es poder incluirla como una cantidad conocida en la parte no medible del modelo, lo que permite obtener mejores resultados de rechazo a ruido que un OA.

VI. AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue financiado en parte por Proyecto CONACyT, 51244; Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) UNAM, IN117610 y por una beca del CONACyT para I. Mendoza.

REFERENCIAS

- Bastin G., Dochain D. (1990). *On-line estimation and adaptive control of bioreactors*. Elsevier Science Ltd.
- Dochain, Denis (2008). *Automatic Control of Bioprocesses*. WILEY.
- Farza, M., K. Busawon y H. Hammouri (1998). Simple nonlinear observers for on-line estimation of kinetic rates in bioreactors. *Automatica* **34:3**, 301–318.
- Farza, M., M. Nadri y H. Hammouri (2000). Nonlinear observation of specific growth rate in aerobic fermentation processes. *Bioprocess and Biosystems Engineering* **23(4)**, 359–366.
- Guzmán, E.; Moreno, J. (2011). A new recursive finite-time convergent parameter estimation algorithm. *18th IFAC World Congress, Milan, Italy, August 28- September 2*, p. 3439 – 3444.
- Moreno, J. A. (2011). *Sliding Modes after the first decade of the 21st Century*. Cap. Lyapunov Approach for Analysis and Design of Second Order Sliding Mode, pp. 113 – 150. Springer-Verlag, LNCIS 412.
- Moreno, J.A. y M. Osorio (2008). A Lyapunov approach to second-order sliding mode controllers and observers. En: *Decision and Control, 2008. CDC 2008. 47th IEEE Conference on*. IEEE. pp. 2856–2861.
- Pawlowski, L.; Bernard, O.; Le Floch E.; Sciandra A. (2002). Qualitative behaviour of a phytoplankton growth model in a photobioreactor. *15th Triennial World Congress, Barcelona, Spain*.
- Selisteanu, Dan, Emil Petre, Constantin Marin y Dorin Cendrescu (2009). High-gain observers for estimation of kinetics in a nonlinear bioprocess. *Proceedings of the 9th International Joint Conference (ICROS-SICE 2009), Japan*.

Referencias

- [Alford06] Alford, J. S. Bioprocess control: Advances and challenges. *Computers and Chemical Engineering*, 30:1464–1475, 2006.
- [Bastin90] Bastin, G. y Dochain, D. *On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactors*. Elsevier Science Ltd, 1990. ISBN 0444884300.
- [Chen96] Chen, L. y Bastin, G. Structural identifiability of the yield coefficients in bioprocess models when the reaction rates are unknown. *Mathematical Biosciences*, 132:35–67, 1996.
- [Cruz-Zavala10a] Cruz-Zavala, E. *Algoritmo Super-Twisting con convergencia exacta y uniforme*. Master thesis, UNAM Facultad de Ingeniería, 2010.
- [Cruz-Zavala10b] Cruz-Zavala, E., Moreno, J. A., y Fridman, L. Uniform robust exact differentiator. *49th IEEE Conference on Decision and Control. Atlanta, Georgia, USA*, Dec 2010.
- [Davila05] Davila, J., Fridman, L., y Levant, A. Second-order sliding-modes observers for mechanical systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 50(11):1785–1789, 2005.
- [Dochain03] Dochain, D. State and parameter estimation in chemical and biochemical processes: a tutorial. *Journal of process control*, 13(8):801–818, 2003.
- [Dochain08] Dochain, D. *Automatic Control of Bioprocesses*. WILEY, 2008. ISBN 978-1-84821-025-7.

- [Doran95] Doran, M., P. *Bioprocess Engineering Principles*. Academic Press London, 1995. ISBN 0122208552.
- [Farza98] Farza, M., Busawon, K., y Hammouri, H. Simple nonlinear observers for on-line estimation of kinetic rates in bioreactors. *Automatica*, 34:3:301–318, 1998.
- [Farza00] Farza, M., Nadri, M., y Hammouri, H. Nonlinear Observation of Specific Growth Rate in Aerobic Fermentation Processes. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, 23(4):359–366, 2000. ISSN 1615-7591.
- [Fridman02] Fridman, L. y Levant, A. *Sliding Mode Control in Engineering*, cap. Higher order sliding modes, págs. pp.53–101. Marcel Dekker, 2002. ISBN 0824706714.
- [Fridman07] Fridman, L., Shtessel, Y., Edwards, C., y Yan, X. Higher-order sliding-mode observer for state estimation and input reconstruction in nonlinear systems. *International Journal of Robust Control and Nonlinear Control*, 2007.
- [Guzmán11] Guzmán, J., E.; Moreno. A new recursive finite-time convergent parameter estimation algorithm. *18th IFAC World Congress, Milan, Italy, August 28- September 2, pp. 3439 – 3444.*, 2011.
- [Harmand08] Harmand, J., Rapaport, A., Dochain, D., y Lobry, C. Microbial Ecology and Bioprocess Control: Opportunities and Challenges. *Journal of Process Control*, 18(9):865–875, 2008. ISSN 0959-1524.
- [Hocalar11] Hocalar, A., Turker, M., Karakuzu, C., y Yuzgec, U. Comparison of Different Estimation Techniques for Biomass Concentration in Large Scale Yeast Fermentation. *ISA transactions*, 2011. ISSN 0019-0578.
- [Hulhoven06] Hulhoven, X. *Bioprocess Software Sensors Development Facing Modelling and Model Uncertainties*. Phd thesis, Université Libre de Bruxelles, 2006.

- [Kiviharju08] Kiviharju, K., Salonen, K., Moilanen, U., y Eerikäinen, T. Biomass measurements online: the performance of in situ measurements and software sensors. *Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology*, 35:657–665, 2008.
- [Levant93] Levant, A. Sliding Order and Sliding Accuracy in Sliding Mode Control. *International Journal of Control*, 58(6):1247–1263, 1993. ISSN 0020-7179.
- [Levant98] Levant, A. Robust exact differentiation via sliding mode technique. *Automatica*, 34(3):379–384, 1998.
- [Levant03] Levant, A. Introduction to High-Order Sliding Modes. *School of Mathematical Sciences, Israel*, 2002 – 2003.
- [Levant05a] Levant, A. Homogeneity approach to high-order sliding mode design. *Automatica*, 41(5):823–830, 2005.
- [Levant05b] Levant, A. Quasi-Continuous High-Order Sliding-Mode Controllers. *Automatic Control, IEEE Transactions on*, 50(11):1812–1816, 2005. ISSN 0018-9286.
- [Levant07] Levant, A. Principles of 2-sliding mode design. *Automatica*, 43(4):576–586, 2007.
- [Moreno08] Moreno, J. y Osorio, M. A Lyapunov Approach to Second-Order Sliding Mode Controllers and Observers. *En Decision and Control, 2008. CDC 2008. 47th IEEE Conference on*, págs. 2856–2861. IEEE, 2008. ISSN 0191-2216.
- [Moreno09] Moreno, J. A. A Linear Framework for the Robust Estability Analysis of a Generalized Super-Twisting Algorithm. *En Electrical Engineering, Computing Science and Automatic Control, CCE, 2009 6th International Conference on Decision and Control*. 2009.

- [Moreno10] Moreno, J., Alvarez, J., Rocha-Cózatl, E., y Diaz-Salgado, J. Super-Twisting Observer-Based Output Feedback Control of a Class of Continuous Exothermic Chemical Reactors. *En 2010 9th International Symposium on Dynamics and Control of Process Systems, DYCOPS*, págs. 719–724. IFAC, July 5-7 2010.
- [Moreno11] Moreno, J. A. *Sliding Modes After the First Decade of the 21st Century*, cap. Lyapunov Approach for Analysis and Design of Second Order Sliding Mode, págs. 113 – 150. Springer-Verlag, LNCIS 412, 2011.
- [Najafpour07] Najafpour, G. D. *Biochemical Engineering and Biotechnology*. Elsevier, 2007. ISBN 0-444-52845-8.
- [Nielsen02] Nielsen, J., Villadsen, J., y Liden, G. *Bioreaction Engineering Principles, 2nd ed.* Kluwer Academic and Plenum Publishers, 2002. ISBN 0-306-47349-6.
- [Pawlowski02] Pawlowski, L., Bernard, O., Le Floch, E., y Sciandra, A. Qualitative behaviour of a phytoplankton growth model in a photobioreactor. *15th Triennial Worl Congress, Barcelona, Spain*, 2002.
- [Pisano07] Pisano, A. y Usai, E. Globally convergent real-time differentiation via second order sliding modes. *International Journal of Systems Science*, 38(10):833–844, 2007.
- [Polyakov09] Polyakov, A. y Poznyak, A. Reaching Time Estimation for Super-Twisting Second Order Sliding Mode Controller via Lyapunov Function Designing. *Automatic Control, IEEE Transactions on*, 54(8):1951–1955, 2009. ISSN 0018-9286.
- [Roman09] Roman, M., Bobasu, E., Petre, E., Selisteanu, D., y Sendrescu, D. Pseudo Bond Graph Modelling of Some Prototype Bioprocesses. *Journal of Control Engineering and Applied Informatics*, 11(2):22–29, 2009.

- [Schugerl01] Schugerl, K. Progress in monitoring, modeling and control of bioprocess during the last 20 years. *Journal of Biotechnology*, 85:149–173, 2001.
- [Selisteanu09] Selisteanu, D., Petre, E., Marin, C., y Cendrescu, D. High-gain observers for estimation of kinetics in a nonlinear bioprocess. *En Proceedings of the 9th International Joint Conference (ICROS-SICE 2009), Japan*. August 2009.
- [Selisteanu10] Selisteanu, D., Petre, E., Roman, M., Sendrescu, D., y Popescu, D. Online estimation of kinetic rates in a baker’s yeast fed-batch bioprocess. *En Proceedings of the 29th Chinese Control Conference*. July 2010.
- [Slotine91] Slotine, J., Li, W., et al. *Applied Nonlinear Control*. Prentice hall Englewood Cliffs, New Jersey, 1^a ed^{ón}., 1991.
- [Spurgeon08] Spurgeon, S. K. Sliding Mode Observers: a Survey. *International Journal of Systems Science*, 39(8):751–764, 2008. ISSN 0020-7721.
- [Vargas11] Vargas, A., Moreno, J., y Mendoza, I. Time-optimal output feedback controller for toxic wastewater treatment in a fed-batch bioreactor. *18th IFAC World Congress, Milan, Italy, August 28- September 2, pp. 3812 – 3817.*, 2011.
- [Young99] Young, K., Utkin, V., y Ozguner, U. A Control Engineer’s Guide to Sliding Mode Control. *Control Systems Technology, IEEE Transactions on*, 7(3):328–342, 1999. ISSN 1063-6536.