



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA  
INGENIERÍA AMBIENTAL – AGUA

DESARROLLO E IMPLEMENTACIÓN DE SENSORES POR SOFTWARE  
PARA PROCESOS DE TRATAMIENTO DE AGUAS

T E S I S  
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:  
JULIÁN DAVID OVIEDO SANTANA

TUTOR PRINCIPAL  
ALEJANDRO VARGAS CASILLAS, II  
COMITÉ TUTOR  
JAIME ALBERTO MORENO PÉREZ, II  
ALFONSO DURÁN MORENO, FQ

MÉXICO, D. F. OCTUBRE 2013

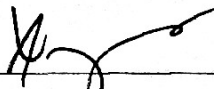
**JURADO ASIGNADO:**

Presidente:	Dr Jaime Alberto Moreno Pérez
Secretario:	Dr Alejandro Vargas Casillas
Vocal:	Dr Víctor Alcaraz González
1 <sup>er</sup> . Suplente:	Dr Gerardo René Espinosa Pérez
2 <sup>do</sup> . Suplente:	Dr Alfonso Durán Moreno

Esta tesis fue realizada en el Laboratorio de Investigación en Procesos Avanzados de Tratamiento de Aguas de la Unidad Académica Juriquilla del Instituto de Ingeniería de la UNAM.

**TUTOR DE TESIS:**

Dr Alejandro Vargas Casillas

  
\_\_\_\_\_  
FIRMA

*A ustedes...*

Siete mil millones de almas, habitando en un reducido volumen. Fue por ellos que en un principio tomamos la decisión de iniciar este maravilloso camino.

Esperamos que en un futuro (no muy lejano) contribuya de buena manera hacia el conocimiento y bienestar de todos.

## Agradecimientos

Son tantos los seres que se vieron directa e indirectamente involucrados en llevar a cabo esta empresa, que no basta con un par de páginas para agradecer a cada uno en específico. Sin embargo, quisiera dedicarles cuando menos, unas cortas palabras de gratitud que reflejen lo importante que fue contar con su colaboración.

En primera instancia, agradezco al Espíritu por ser mi guía diario y permitirme vivir esta maravillosa experiencia. A mis padres por ser el arquetipo de crianza, apoyarme durante el transcurso de toda una vida y sobretodo su amor incondicional. A la tía Cata, Caro y David por formar parte fundamental de nuestras vidas y estar siempre presentes. También a la pequeña Metallica quien le dio un vuelco a mi vida y me mantiene motivado a diario.

A Sir Richard Branson, Paramahansa Yogananda y Edna Gutierrez por indicarme el camino y darme el “empujoncito” que necesitaba.

A mis profesores de licenciatura, la Mtra. Myrna Aguilar y el Mtro. Bernardo de La Merced por sus enseñanzas e incentivos para iniciar estudios de posgrado; a Miguel (Mike) Ramos por su apoyo y motivación constante durante los últimos años y por enseñarme que las adversidades se superan llegando al límite propio.

A Abraham y Luis Romo, así como a Cristian Jullian, por otorgarme tan generosa oportunidad y abrirme las puertas cuando lo necesité.

A Eduardo Solís y Toño Campos, seres de prolífica bondad y altruismo, quienes se han convertido en extensión de nuestra familia.

Al CONACyT por el apoyo económico otorgado. Al personal de la UNAM en general, ya que su recibimiento ha sido espléndido. En particular, a la Ing. Cristina Aráoz por su apoyo incondicional y su dedicación al alumnado, la Mtra. Virgina Corral por su increíble cordialidad, constante apoyo y actitud proactiva y, a la Mtra. Abril Moreno por los cursos preparatorios para el ingreso a la maestría.

A el Dr Jaime Moreno y el Dr Alfonso Durán por su grata labor como co-tutores y haber contribuido al desarrollo cabal de esta tesis. De igual manera por su colaboración y compromiso, al Dr Ixbalank Torres, quién estuvo ahí cuando su ayuda fue necesaria. A Eva Noria por apoyarme en la experimentación y aquellas enseñanzas compartidas.

A todo el personal del Instituto de Ingeniería de la Unidad Académica Juriquilla, puesto que nos recibieron afablemente. Destacando a mis profesores de maestría, el Dr Germán Buitrón por su crítica ejemplar y liderazgo; el Dr Iván Moreno por sus agradables y relajadas conversaciones; la Mtra. Gloria Moreno, ser ejemplar; y el Mtro. Jaime Pérez, invicto en ping-pong y por ser la persona más servicial que conozco; también a Alma Nieto quien colabora generosamente y vela por el bienestar del personal.

Agradezco a mis compañeros de maestría durante estos dos cortos años por aquella mutua colaboración. Es un honor llegar dirigirme a ustedes bajo el título de maestro(a): Andrés Martínez, Cristina Bujanos, Sonia Santiago, René Cardeña e Israel López y con un especial agradecimiento a Sandra Carlos y Gerardo Muñoz.

Al equipo de trabajo de *Service d'Automatique* de la Universidad de Mons por el recibimiento y apoyo durante la estancia académica. Con especial énfasis, agradezco al Dr Alain Vande Wouwer, Mtro. Guilherme Araujo y Mtra. Giannina Giovanini.

A Leonardo Torres, Jessica Chacón, Kenya Galicia, Toño Lopez, Leidy Tammi, Anne Sophie Pérez y Víctor Zúñiga por una sincera amistad. A Evangelina Servín, Norma Montaña, Laura Espinosa, David García, Blanca Gamboa y Benito Avilés quienes me brindaron apoyo en el momento adecuado.

Finalmente, pero no menos, quisiera agradecer a la persona que hizo posible la realización de este trabajo y gesta, el Dr Alejandro Vargas. Fue un honor tenerlo como tutor y aprender centenares de cosas de él. Admiro con vehemencia su disposición por impartir conocimiento, aprecio sobretodo que me haya aceptado y permitiera haber formado parte de su equipo.

*Tienes derecho a desempeñar tu deber prescrito, mas no a los frutos de la acción.  
Nunca consideres que eres la causa de los resultados de tus actividades y, jamás  
ignores cumplir con tu deber.  
Desempeña tu deber de un modo equilibrado, ¡oh, Arjuna!, abandonando todo  
apego al éxito o al fracaso. Esa clase de ecuanimidad se denomina yoga.*

*Bhagavad Gita, II 47-48.*

# Contenido

Lista de figuras . . . . .	V
Lista de tablas . . . . .	VI
Nomenclatura . . . . .	VII
Resumen . . . . .	XI
Abstract . . . . .	XII
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Organización de la tesis . . . . .	1
1.2. Motivación y justificación . . . . .	2
1.3. Objetivos . . . . .	5
1.3.1. Objetivo general . . . . .	5
1.3.2. Objetivos específicos . . . . .	5
1.4. Metas . . . . .	6
1.5. Hipótesis . . . . .	6
<b>2. Antecedentes</b>	<b>7</b>
2.1. Tratamiento de aguas residuales . . . . .	7
2.2. Degradación de compuestos inhibitorios . . . . .	8
2.2.1. 4-clorofenol (4-CF) . . . . .	9
2.3. Reactor discontinuo secuencial (SBR) . . . . .	9
2.4. Respirometría . . . . .	12
2.5. Modelado y control de bioprocesos . . . . .	14
2.5.1. Importancia del modelado y control . . . . .	14
2.5.2. Generalidades sobre sensores . . . . .	15
2.5.3. Sistemas de control experto . . . . .	17
2.6. Esquemas de estimación . . . . .	18
<b>3. Metodología</b>	<b>23</b>
3.1. Montaje de un proceso de degradación de 4-clorofenol . . . . .	25
3.1.1. Reactor piloto . . . . .	25
3.1.2. Inóculo . . . . .	25

3.1.3.	Aclimatación . . . . .	26
3.1.4.	Técnicas analíticas . . . . .	27
3.2.	Algoritmos de control e interfaces . . . . .	28
3.3.	Respirómetro . . . . .	28
3.3.1.	Montaje y experimentación . . . . .	29
<b>4.</b>	<b>Resultados y discusión</b>	<b>31</b>
4.1.	Etapa 1	
	Obtención de las tasas de respiración . . . . .	31
4.1.1.	Descripción del esquema de estimación . . . . .	31
4.1.2.	Ajuste al modelo . . . . .	39
4.1.3.	Ajuste experimental del modelo de reacción . . . . .	43
4.1.4.	Prueba del observador . . . . .	45
4.2.	Etapa 2	
	Señal real de oxígeno disuelto . . . . .	49
4.2.1.	Caracterización de sensores de DO . . . . .	50
4.2.2.	Reconstrucción de la entrada . . . . .	54
4.3.	Etapa 3	
	Validación del esquema de estimación propuesto . . . . .	56
4.3.1.	Estrategia de control de tiempo óptimo dirigido por eventos (ED-TOC) . . . . .	59
4.3.2.	Aplicación del algoritmo . . . . .	68
<b>5.</b>	<b>Conclusiones y perspectivas</b>	<b>82</b>
	<b>Referencias</b>	<b>89</b>



# Lista de figuras

1.1. Proceso para la determinación de la tasa de respiración estimada . . .	5
2.1. Fases de operación de un SBR . . . . .	10
2.2. Relación entre respiración, utilización de sustrato y crecimiento . . .	13
2.3. Esquema general de los sistemas de control e información en bioprocesos . . . . .	16
2.4. Esquema de general de estimación . . . . .	20
3.1. Estrategia experimental seguida . . . . .	24
3.2. Reactor aerobio SBR automatizado . . . . .	26
3.3. Diagrama esquemático del sistema . . . . .	27
3.4. Respirómetro, instrumento virtual . . . . .	28
4.1. Esquema del diseño de un observador . . . . .	32
4.2. Representación del error $e_1$ en función de $\phi_1$ . . . . .	36
4.3. Experimento en batch . . . . .	44
4.4. Experimento en pulse-batch . . . . .	45
4.5. Oxígeno disuelto e intervalos de alimentación en un pulse-batch a partir de datos experimentales . . . . .	46
4.6. Volumen y flujo de entrada en un pulse-batch . . . . .	47
4.7. Estimación de la tasa de respiración con observador super-twisting .	48
4.8. Proceso para la caracterización de sensores . . . . .	51
4.9. Aproximación de la dinámica del sensor Endress+Hauser a un sistema de segundo orden . . . . .	52
4.10. Aproximación de la dinámica del sensor Mettler Toledo a un sistema de segundo orden . . . . .	53
4.11. Reconstrucción del oxígeno disuelto . . . . .	55
4.12. Estrategia ED-TOC . . . . .	57
4.13. Máquina de estados finitos de ED-TOC . . . . .	59
4.14. Representación gráfica de la notación del algoritmo ED-TOC . . . .	67
4.15. Datos recuperados de archivo histórico ED-TOC . . . . .	68

4.16. Estimaciones del DO mediante un sistema de dos observadores super-twisting y filtros digitales . . . . .	70
4.17. Estimaciones del DO mediante dos observadores. Acercamiento . . .	71
4.18. Recuperación del DO y $\gamma$ . . . . .	73
4.19. Estimaciones del DO y $\gamma$ . Acercamiento . . . . .	74
4.20. Cambios de régimen simulados . . . . .	75
4.21. Simulación de subconjuntos de datos de ED-TOC. Sin cambio de régimen . . . . .	77
4.22. Simulación de subconjuntos de datos de ED-TOC. Cambio tardío de régimen . . . . .	78
4.23. Simulación de subconjuntos de datos de ED-TOC. Cambio adecua- do de régimen . . . . .	78

# Lista de tablas

2.1. Ventajas y desventajas de métodos de monitoreo y estimación . . . . .	22
4.1. Constantes utilizadas en la calibración del modelo del sensor del biorreactor . . . . .	53
4.2. Constantes utilizadas en la calibración del modelo del sensor del respirómetro . . . . .	54
4.3. Constantes utilizadas en la reconstrucción de la entrada . . . . .	55
4.4. Parámetros del observador super-twisting para estimar el DO . . . . .	72
4.5. Valores de parámetros OMUR con entrada $DO_{ST}$ . . . . .	74
4.6. Historial de los cambios de régimen para un archivo ED-TOC dado	80
4.7. Estudio estadístico de los cambios de régimen para un archivo ED- TOC dado . . . . .	81

# Nomenclatura

## Símbolos

$\delta_{1,2}(t)$	Incertidumbres del proceso
$\forall$	Para todo
$\gamma$	Consumo másico de oxígeno, OMUR
$\mu_{Pi}$	Tasa específica de producción
$\mu_S$	Tasa específica de biodegradación
$\mu_X$	Tasa específica de crecimiento
$\phi_{1,2}$	Función del error
$\psi(t)$	Comportamiento simulado de la concentración de oxígeno disuelto
$\rho(t)$	Tasa de respiración, OUR
$\tau$	Constante de tiempo
$\zeta$	Coefficiente de amortiguamiento

## Abreviaturas

$b$	Tasa de respiración endógena
$C_{in}$	Concentración de oxígeno disuelto en el influente
$C_{sat}$	Concentración de saturación del oxígeno disuelto
$C(t)$	Concentración de oxígeno disuelto verdadera
$\hat{C}(t)$	Estimación de la concentración real de oxígeno disuelto
$d$	Día
$D_{in}$	Tasa de dilución
$e_1$	Error de medición
$e_2$	Error de observación
$h$	Hora
$k_c\mu_S$	Tasa de respiración metabólica
$k_d$	Tasa de mortalidad
$k_{La}$	Coefficiente de transferencia de masa (del oxígeno)
$l_{(1,2)}$	Ganancias del observador
$L$	Litro
$mg$	Miligramo

---

min	Minuto
mL	Mililitro
nm	Nanómetro
$P_i$	Productos o sustratos intermediarios
$Q_{air}$	Flujo de aire
$Q_{in}$	Flujo de entrada
$r_S(S)$	Tasa fundamental de consumo de sustrato
s	Segundo
$S_0^-$	Concentración residual de sustrato antes del llenado
$S$	Concentración de sustrato dentro del reactor
$S^*$	Concentración óptima de sustrato
$S_f$	Concentración final de sustrato
$S_{in}$	Concentración de sustrato en el influente
$t$	Tiempo
$u$	Variables de entrada de un sistema
$V$	Volumen
$V_0$	Volumen inicial
$V_f$	Volumen final
$x$	Estados ó variables internas de un sistema
$X$	Concentración de biomasa en el reactor
$X_0$	Concentración inicial de biomasa
$X(t)V(t)$	Masa de la biomasa
$y(t)$	Señal de oxígeno disuelto medido por el sensor
$y_{filt}(t)$	Señal filtrada de oxígeno disuelto medido por el sensor

### Acrónimos

4-CF	4-clorofenol
ANN	Redes neuronales artificiales ( <i>Artificial Neural Networks</i> )
ATP	Adenosín tri-fosfato
CL <sub>50</sub>	Concentración letal media
DO, $C$	Oxígeno disuelto ( <i>Dissolved Oxygen</i> )

ED-TOC	Control de tiempo óptimo dirigido por eventos ( <i>Event-Driven Time Optimal Control</i> )
EKF	Filtro de Kalman Extendido ( <i>Extended Kalman Filter</i> )
FLC	Control por lógica difusa ( <i>Fuzzy Logic Control</i> )
FNN	Redes neuronales difusas ( <i>Fuzzy Neural Networks</i> )
FTC	Estrategia de tiempos fijos ( <i>Fixed Time Control</i> )
HMI	Interfaz de usuario ( <i>Human Machine Interface</i> )
HRT	Tiempo de retención hidráulica ( <i>Hydraulic Retention Time</i> )
LMI	Desigualdades matriciales lineales ( <i>Linear Matriz Inequalities</i> )
OB-TOC	Control de tiempo óptimo basado en observadores ( <i>Observer-based Time Optimal Control</i> )
SBR	Reactor discontinuo secuencial ( <i>Sequencing Batch Reactor</i> )
SRT	Tiempo de retención celular ( <i>Solids Retention Time</i> )
<i>ST</i>	super-twisting (Observador)
TSS	Sólidos suspendidos totales ( <i>Total Suspended Solids</i> )
VSS	Sólidos suspendidos volátiles ( <i>Volatile Suspended Solids</i> )

### Unidades

$\gamma$	mgDO/h
$\mu_S$	$\text{h}^{-1}$
$\mu_X$	$\text{h}^{-1}$
$\rho(t)$	mgDO/L/h
$C_{sat}$	mg/L
$C(t)$	mg/L
$\hat{C}(t)$	mg/L
$D_{in}$	$\text{h}^{-1}$
$k_L a$	$\text{h}^{-1}$
$Q_{air}$	L/min
$Q_{in}$	L/h
$S$	mg/L
$S^*$	mg/L
$S_{in}$	mg/L

$V$	L
$X$	mg/L
$X_0$	mg/L
$y(t)$	mg/L
$y_{filt}(t)$	mg/L
4-CF	mg/L
DO, $C$	mg/L
HRT	d
SRT	d
TSS	mg/L
VSS	mg/L

## Resumen

En biorreactores aerobios, la tasa de respiración puede ser medida mediante respirómetros. Sin embargo, estos son más apropiados para sistemas continuos a gran escala con largos tiempos de retención hidráulica (HRT, por sus siglas en inglés), en virtud que la actividad de los microorganismos varía lentamente en el tiempo.

En reactores discontinuos secuenciales (SBR, por sus siglas en inglés), usados para tratar agua residual tóxica mediante técnicas de lote-alimentado para minimizar los tiempos de reacción, se necesita de un dispositivo de rápida medición, ya que en algunos casos la duración de la etapa de reacción es de apenas dos horas. Los sensores de oxígeno disuelto (DO, por sus siglas en inglés) son confiables, económicos y proveen información en-línea útil que puede ser usada como una herramienta que ayuda a determinar aquello que no puede ser medido con facilidad.

Los sensores por software, también conocidos como observadores, representan una creciente alternativa hacia la respirometría convencional, proporcionando atractivas ventajas como facilidad de operación o implementación, costos bajos y velocidad de respuesta alta. No obstante presentan limitaciones en cuanto a tolerancia al ruido y algunos pueden requerir amplio conocimiento del modelo del sistema.

En este trabajo se propone hacer uso de aquellas mediciones de DO como variable de entrada para un observador por modos deslizantes de orden superior, el denominado observador super-twisting. La ventaja de este tipo de observador con respecto a los demás, por ejemplo un filtro de Kalman extendido, está en su robustez inherente y especificaciones mínimas del modelo, tal como se discutirá posteriormente.

Para probar el observador se usó un montaje experimental que consistió en un biorreactor piloto de laboratorio SBR aerobio completamente automatizado. También se implementó un pequeño respirómetro de diseño propio, cuyas muestras se tomaron cada cinco minutos para evaluar el desempeño del observador diseñado.



## Abstract

Respiration rate in aerobic bioreactors can be measured using respirometers. However these are more suitable for large-scale continuous systems with large HRT, since the activity of microorganisms is slowly time varying.

In a SBR bioreactor used to treat wastewater using fed-batch techniques to minimize reaction times, a fast measuring device is needed, since in some cases those reaction times are of the order of two hours or less. Even a respirometer taking samples every five minutes would be insufficient if the controller actions are critical. However, DO sensors are reliable and cheap, and they provide useful on-line information that can be used as a tool that helps to determine what cannot be easily measured.

Software sensors, commonly known as observers, are an increasing alternative to conventional respirometry yielding some attractive advantages such as ease of operation and/or implementation, low costs and high response speed. Nonetheless there exist some limitations on their use such as low tolerance to noise and some of them require wide knowledge of the system.

This work proposes making use of those DO measurements as input variable for a high order sliding mode observer, the so called super-twisting observer. The advantage of this type of observer with respect to others (e.g. the Extended Kalman Filter) is its inherent robustness and minimal model specifications, as will be later discussed.

In order to test this observer we did not rely on a simulation model, but instead used an experimental setup consisting on a fully automated pilot laboratory aerobic SBR. A small self-made respirometer taking samples every five minutes was also implemented to assess the performance of the designed observer.

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Organización de la tesis

La presente tesis presenta todos los acrónimos con base en sus siglas en inglés y se encuentra dividida de la siguiente manera:

#### 1. **Introducción**

Se presenta la motivación y relevancia del trabajo de investigación. A continuación se enuncian los objetivos, tanto el general como los específicos; las metas esperadas y por último, el planteamiento de las hipótesis.

#### 2. **Antecedentes**

Se dan a continuación las generalidades acerca del tratamiento de aguas residuales y el estado del arte del monitoreo, modelado y control de bioprocesos; haciendo hincapié en esquemas de estimación.

#### 3. **Metodología**

Se presentan y describen los materiales y métodos utilizados en la experimentación.

#### 4. **Resultados y discusión**

De acuerdo a las etapas seguidas en la metodología, se tiene que:

En la primera etapa se montó y arrancó un reactor discontinuo secuencial aerobio con 4-clorofenol como compuesto tóxico. Se montó también un respirómetro en paralelo para medir la actividad metabólica microbiana determinada por la tasa de respiración. Se ejecutaron múltiples corridas experimentales para acoplar un modelo matemático que representara el comportamiento del reactor. Finalmente, se llevó a cabo la prueba del observador a partir de un sistema real; es decir, se implementó el observador super-twisting y se obtuvieron resultados comparables con los experimentales.

En la segunda etapa se caracterizó la instrumentación utilizada y se da la posibilidad de recuperar la señal original de oxígeno disuelto antes de la medición (DO real). Por tanto, se presenta una estrategia para estimar la concentración de oxígeno disuelto dentro del biorreactor para un tiempo determinado, a fin de que se tengan valores acertados de la tasa de respiración.

Por último, en la tercera etapa se realizó la comparación de resultados del observador contra los resultados de los datos históricos de la estrategia de control de tiempo óptimo, ED-TOC. El objetivo de este capítulo es mostrar que el uso de las estrategias de estimación propuestas para estimar una variable crítica para tomar decisiones del proceso podría resultar en ahorros significativos en el tiempo de reacción.

## 5. Conclusiones y perspectivas

En la última parte de este escrito se presentan las conclusiones y perspectivas, finalizando con las referencias alusivas al trabajo de investigación.

## 1.2. Motivación y justificación

En la actualidad, la correcta medición de las variables involucradas en los procesos bioquímicos (bioprocesos), en particular el tratamiento de aguas residuales, es un factor de suma importancia para garantizar el funcionamiento adecuado de una planta. Existe cierta complejidad al realizar la medición de dichas variables, al

grado que hay algunas que no pueden ser medidas (al menos no con facilidad), imposibilitando algunas estrategias de control. La falta de actuadores y sensores en línea, el elevado costo de inversión/mantenimiento y una velocidad de respuesta insuficiente, hacen que la medición de variables en tiempo real sea una tarea compleja. La futura implementación de herramientas de optimización y sistemas de control se ve afectada por qué tan buena o fiel es la determinación de estas variables.

La tasa de respiración, al ser un indicador de la actividad metabólica de los microorganismos, resulta de particular interés; está relacionada con la tasa de reacción (biodegradación) [Mendoza, 2011] y conocerla permite identificar importantes procesos bioquímicos como el crecimiento de biomasa y la remoción de sustrato. No obstante, dado lo complejo que pueden llegar a ser los sistemas biológicos, la medición involucra incertidumbre.

Debido al extenso uso de los respirómetros como estándares en la determinación de la tasa de respiración, podrían considerarse exentos de modificaciones y mejoras o inclusive de ser reemplazados. Aun así, estos poseen ciertas desventajas que obstaculizan el monitoreo en línea de la planta. Entre ellas destacan dos: la posibilidad de alterar el proceso en la etapa de muestreo y el tiempo requerido para el procesamiento de dicha muestra y realizar la medición. En realidad las mediciones (respirogramas) son “fotografías” de la tasa de respiración unos cuantos minutos atrás.

En procesos como los lodos activados convencionales, no es de suma importancia considerar las desventajas del respirómetro. Por un lado, el volumen de la muestra tomada con respecto al tamaño del reactor resulta ínfimo; por otro, debido a que el proceso es continuo y con largos HRT, es de esperarse que la tasa de respiración varíe lentamente en el tiempo. No obstante, en un proceso en lote (batch) o lote alimentado (fed-batch) sí puede llegar a darse lo anterior, especialmente si se trata de reactores piloto pequeños.

Es menester llevar a cabo una integración de campos de conocimiento, es decir, de especialistas en diversas áreas (e.g. control automático, ingeniería química y ambiental, biología) para formar equipos de investigación interdisciplinarios que evalúen y propongan nuevas estrategias de control en pro de la optimización de

procesos. El aliciente de esta tesis está en encontrar alternativas que permitan estimar en línea y fielmente la tasa de respiración  $\rho(t)$ . Para ello, se propone el uso de sensores por software basados en modos deslizantes, los cuales ofrecen ventajas y propiedades atractivas y, hacen frente a las limitaciones, tanto de los procesos biológicos, como de las estrategias de control previamente utilizadas.

Mediante un conjunto de observadores de tipo *super-twisting* se puede, en primera instancia, estimar la verdadera concentración de oxígeno disuelto  $C(t)$  a partir de la medición de la señal filtrada del oxígeno disuelto medido  $y(t)$ , denominada  $y_{filt}(t)$ ; posteriormente, utilizando un segundo observador *super-twisting*, se estima  $\rho(t)$  a partir de  $\hat{C}(t)$  (estimado de  $C(t)$ ). ¿Por qué dos observadores en cascada? Porque se asume que el segundo observador funciona mejor si se usa una señal similar a  $C(t)$  en lugar de  $y(t)$  o  $y_{filt}(t)$ .

El diagrama de la Figura 1.1 hace referencia al procedimiento de obtención de la tasa de respiración. A partir de un balance de masas, se propone un sistema en donde la *planta*<sup>1</sup> es el biorreactor instrumentado con los sensores. A su vez, se plantean como entradas el flujo de aire ( $Q_{air}$ ) y el flujo de entrada ( $Q_{in}$ ) y, tres variables que podrían resultar de interés como la concentración de biomasa ( $X$ ), concentración de sustrato ( $S$ ) y el oxígeno disuelto ( $C$ ). De ellas, la única posible de medir en línea es el oxígeno disuelto. También se proponen como parámetros a la constante de saturación de oxígeno ( $C_{sat}$ ) y el coeficiente de transferencia de masa ( $k_L a$ ).

---

<sup>1</sup>En control se llama “planta” a cualquier objeto físico que se desee controlar.

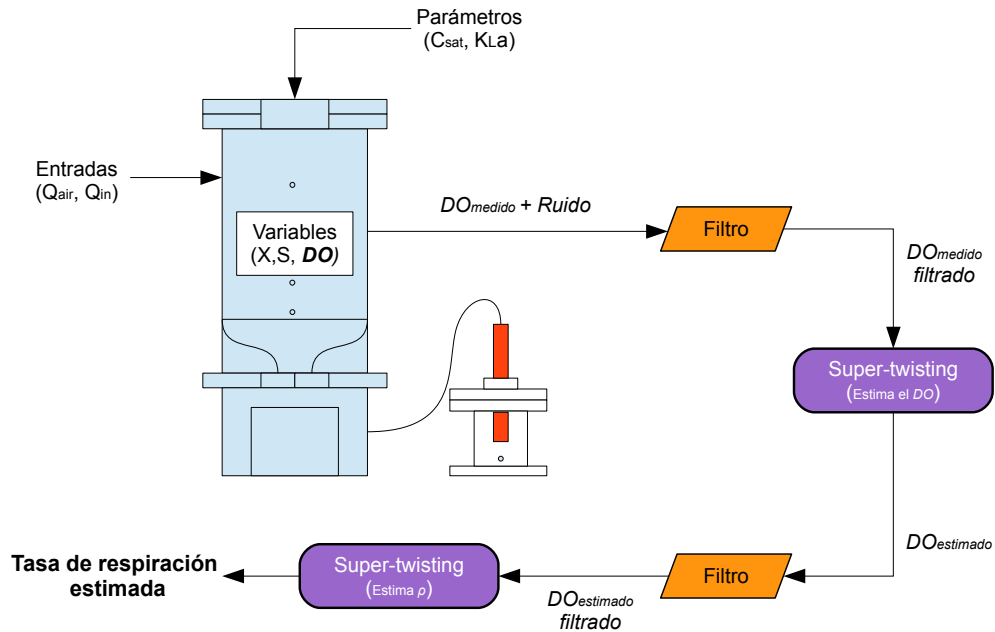


Figura 1.1: Proceso para la determinación de la tasa de respiración estimada.

## 1.3. Objetivos

### 1.3.1. Objetivo general

Validar experimentalmente y con datos históricos el uso de observadores super-twisting en un biorreactor aerobio para estimar la tasa de respiración a partir de (otras) variables que sí puedan ser medidas en línea.

### 1.3.2. Objetivos específicos

1. Determinar valores empíricos de la tasa de respiración de un proceso aerobio de degradación de 4-clorofenol (4-CF).
2. Obtener las propiedades dinámicas de los sensores (físicos) utilizados experimentalmente.

3. Evaluar el desempeño del sensor por software desarrollado por el equipo de investigación.

## 1.4. Metas

1. Construir y probar experimentalmente un respirómetro para medir la tasa de respiración.
2. Estudiar y comprender modelos matemáticos de los sensores de oxígeno disuelto que determinen las velocidades de respuesta de los mismos.
3. Comparar las estimaciones del sensor por software aplicado al modelo, con los datos obtenidos por el respirómetro.
4. Verificar la estimación de la señal original que mide un sensor de oxígeno disuelto.
5. Implementar el observador con datos históricos de la estrategia ED-TOC, de manera que sea posible su validación.

## 1.5. Hipótesis

1. La correcta estimación de la tasa de respiración en un proceso aerobio es factible mediante la implementación de un observador tipo super-twisting.
2. El uso de un observador super-twisting podría mejorar sustancialmente la aplicación de técnicas de control, en particular aquellas que requieren del conocimiento en línea de la tasa de respiración.

# Capítulo 2

## Antecedentes

### 2.1. Tratamiento de aguas residuales

El tratamiento de aguas residuales ha evolucionando rápidamente con el paso del tiempo. Aunque en un principio se consideró exclusivo para la eliminación de la materia orgánica en aguas residuales, posteriormente se le dieron usos como la remoción de nutrientes e.g. nitrógeno y fósforo. Actualmente también se empieza a ver a las aguas residuales como recursos renovables de los cuales pueden extraerse productos de interés o energía; es decir, los procesos son vistos desde la óptica de la biotecnología. La importancia de contar con sistemas de tratamiento de aguas recae en obtener un agua de alta calidad al ser descontaminada, de manera que aporte un beneficio tanto al humano e.g. consumo, necesidades básicas diarias; como al medio ambiente y/o riego de áreas verdes y parques, lavado de autos, usos recreativos, agricultura.

Existen dos grandes grupos de procesos para el tratamiento de aguas. Los físico-químicos, en los cuales intervienen fenómenos abióticos, y los biológicos, en donde se recurre a fenómenos bióticos [Jiménez, 2001]. Tal y como lo describe su nombre, los tratamientos físico-químicos descontaminan el agua por medio de reactivos químicos (neutralización y oxidación química) y métodos físicos (separación y filtración); mientras que en los biológicos interviene la ayuda de microorganismos. Los procesos biológicos son atractivos debido a que ofrecen ventajas de flexibilidad de operación y ahorro sustancial de costos en comparación



con los físico-químicos; y se pueden dividir en dos principales categorías: a) procesos de cultivo suspendido y b) procesos de soporte sólido.

En los procesos biológicos, los microorganismos<sup>1</sup> crecen utilizando los contaminantes del agua como fuente de carbono y/o energía (sustrato), transformándolos en nuevos microorganismos (biomasa) u otros productos (CO<sub>2</sub>). Éstos a su vez, permiten clasificar a los sistemas de tratamiento según su metabolismo en procesos aerobios, si el oxígeno es el principal aceptor de electrones; procesos anóxicos, cuando a bajas concentraciones de oxígeno éste se obtiene de otros elementos (e.g. NO<sub>2</sub>); procesos facultativos, en los que los microorganismos pueden operar en presencia o ausencia de oxígeno; y procesos anaerobios, cuando no requieren de oxígeno en absoluto [Metcalf & Eddy, 2003].

## 2.2. Degradación de compuestos inhibitorios

Existen contaminantes en el agua que son de origen natural, y como consecuencia, pueden ser degradados biológicamente. No obstante, en el caso de aguas de procedencia industrial, existen y se pueden llegar a formar compuestos (sintéticos) que difícilmente pueden ser degradados por los microorganismos; estos se denominan *refractarios*. Entonces, para llevar a cabo la biodegradación de compuestos refractarios es necesario que haya una fase de aclimatación en primera instancia [Moreno-Andrade & Buitrón, 2004]. Esto implica que debe haber una selección y multiplicación de los organismos especializados para que sea posible la degradación.

De particular importancia son los compuestos fenólicos. El fenol (C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>OH) es un compuesto químico orgánico de alto carácter tóxico e inhibitorio. Los fenoles son ampliamente utilizados en la industria e.g. química, papelera, farmacéutica, en la fabricación de explosivos, fertilizantes, pinturas, caucho, asbesto, conservadores de madera, etc. [Jiménez, 2001]. Cabe destacar que, sin importar en cuál de sus formas se presente, pueden llegar a ser perjudiciales e incluso letales para los seres vivos en caso de que altas concentraciones de éstos sean descargadas sin un tratamiento previo al cuerpo de agua receptor.

---

<sup>1</sup>Bacterias (en su mayoría), protozoos, hongos, algas, rotíferos y nemátodos.

### 2.2.1. 4-clorofenol (4-CF)

Los clorofenoles son una de las familias de fenoles más importantes debido a sus características inhibitorias. Dentro de los diversos tipos de clorofenoles se encuentra el 4-clorofenol (4-CF). Su presencia en el agua se da como resultado de la cloración para el blanqueamiento de la pulpa para fabricación de papel y ruptura de plaguicidas. La importancia del tratamiento para remover este compuesto del agua ha sido validada por reportes en donde se afirma que su actividad puede suscitar fallas en el sistema respiratorio, atrofia de huesos y daños en la piel de animales; por lo tanto, la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA) lo ha catalogado como contaminante prioritario.

El tratamiento biológico se considera como la opción para tratar este tipo de compuestos xenobióticos. Desde finales de los años setenta existen cepas puras capaces de degradarlo, sin embargo, no se han podido aplicar del todo al tratamiento de aguas residuales [Westmeier & Rehm, 1987]. No obstante, en virtud de su carácter recalcitrante y acumulable en el ambiente, un tratamiento convencional de lodos activados no podría hacerle frente a variaciones en la concentración en el influente. Para enfrentar estas limitantes, es necesario que la acción degradadora se de por medio de microorganismos especializados y un proceso discontinuo. Es un hecho que el 4-clorofenol es capaz de desestabilizar procesos, pero además sirve como fuente de carbono y energía de biomasa aclimatada.

## 2.3. Reactor discontinuo secuencial (SBR)

En procesos continuos, variaciones en el influente y altas cargas, desacoplan la respiración celular de bacterias y puede ser letal para ellos en ciertas concentraciones (picos), resultando en inhibición del proceso. Por ello, el reactor discontinuo secuencial (SBR) se propone como un sistema efectivo para el tratamiento de estos compuestos. La tecnología SBR es empleada desde la década de los setenta y ampliamente usada debido a su gran flexibilidad para adaptarse a los cambios en composición [Castelló et al., 2002] y también al hecho de que permite el monitoreo cercano del efluente tratado. Todo lo anterior lo hace

candidato a tratar aguas residuales industriales conteniendo fenol como compuesto tóxico [Yoong et al., 2000].

Como su nombre indica, su operación se lleva a cabo en fases de forma secuencial; es decir, al terminar uno, inicia el subsiguiente hasta finalizar el ciclo. Las fases (procesos unitarios) que intervienen son idénticos a los de un proceso convencional de lodos activados. No obstante, una gran ventaja de éste es que en un proceso de lodos activados convencional, las fases se ejecutan en paralelo en varios tanques; mientras que en el SBR se ejecutan en serie en un mismo tanque. Esto se traduce en ahorros sustanciales tanto de espacio, como de inversión y mantenimiento. En el modo de operación convencional del reactor, se destacan cinco fases bien definidas: llenado, reacción, sedimentación, vaciado y tiempo muerto (Figura 2.1). Cabe señalar que se deben escoger los tiempos de cada fase, así como las estrategias de control, en función del tipo y concentración del contaminante.



**Figura 2.1:** Fases de operación de un SBR. Adaptado de [Moreno-Andrade, 2006]

### 2.3.0.1. Llenado

Durante el llenado se introduce el sustrato en el reactor. En esta fase, el reactor puede operar bajo distintas circunstancias para promover reacciones biológicas; es posible llevar a cabo únicamente el mezclado (para condiciones anóxicas o

anaerobias) o bien, mezclado y aireado simultáneo (para condiciones aerobias) [Metcalf & Eddy, 2003]. El objetivo es un mezclado uniforme que establezca buen contacto entre los microorganismos y el sustrato.

#### **2.3.0.2. Reacción**

En el periodo de reacción, se consume el sustrato por parte de la biomasa, bajo condiciones ambientales controladas para la operación eficiente del reactor e.g. temperatura, pH, oxígeno disuelto. El objetivo de esta fase es degradar toda la materia orgánica. Resulta conveniente hacerlo a una máxima tasa de degradación, pues esto permitiría disminuir el tiempo de reacción y por lo tanto también los gastos energéticos. Para ello se han planteado estrategias de control que combinan con ésta la fase anterior de llenado, de manera que la tasa de reacción se mantenga cercana a su máximo, mientras no se alcance el volumen máximo de operación [Pat et al., 2011], [Vargas & Buitrón, 2008], [Moreno-Andrade & Buitrón, 2008], [Moreno et al., 2006], [Betancur et al., 2004], [Vargas et al., 2000].

#### **2.3.0.3. Sedimentación**

En esta fase se suspende la aireación y/o mezclado, tal que la biomasa es separada del líquido mediante la acción de la gravedad. Posteriormente el sobrenadante clarificado puede ser vaciado en el efluente.

#### **2.3.0.4. Vaciado**

En el vaciado, una vez separados lodo y agua, se remueve el sobrenadante clarificado. La biomasa es mantenida dentro del reactor con un remanente de agua.

#### **2.3.0.5. Tiempo muerto**

Corresponde al tiempo entre el vaciado y llenado. Puede ser omitido con base en las necesidades del proceso.

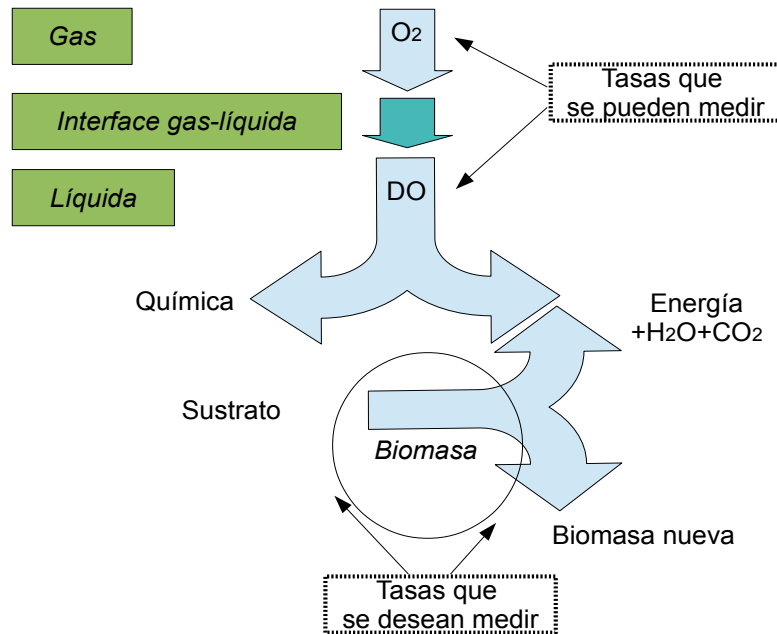
## 2.4. Respirimetría

La respirometría se define como la medición e interpretación de la tasa de consumo biológico de oxígeno (tasa de respiración); en otras palabras, la cantidad de oxígeno por unidad de volumen y tiempo consumida por los microorganismos, bajo condiciones experimentales bien definidas [Vanrolleghem, 2002]. Es considerada una fuente de información muy importante en el monitoreo, modelado y control de lodos activados, en virtud de que está directamente relacionada con dos de los procesos más importantes de lodos activados (crecimiento de biomasa y remoción de sustrato). La medición de la tasa de respiración se ejecuta con respirómetros. Estos instrumentos pueden tener dos variantes dependiendo de la técnica usada. Una de ellas usa el oxígeno disuelto (DO) del líquido para una medición directa; mientras que en la otra, se toma una medición indirecta a partir del oxígeno gaseoso ( $O_2$ ). En la actualidad, los de medición directa conllevan el uso de un sensor en línea de DO y corresponden, en el tratamiento de aguas, a un 50% de la gama comercial.

Con base en lo mencionado anteriormente, en la Figura 2.2 se esquematiza cómo el crecimiento de biomasa y remoción de sustrato están ligados con tres fases (biomasa, fase líquida y gaseosa) y cómo la tasa de respiración se evalúa a partir de la fase líquida o gaseosa.

La respiración genera energía en forma de ATP a partir de la oxidación del sustrato. El consumo de oxígeno se debe a tres factores: la respiración carbonosa que explica el consumo de oxígeno cuando hay exceso de sustrato oxidado por microorganismos heterogéneos; la respiración endógena que define el consumo de oxígeno en ausencia de sustrato (ciclo muerte-regeneración, energía de mantenimiento, respiración de protozoos); y la nitrificación, que se lleva a cabo por biomasa autótrofa [Zielińska et al., 2012]. Por lo tanto, es importante tener en cuenta que, de existir microorganismos autótrofos, se puede llegar a dar cierto consumo de oxígeno debido a la nitrificación y; por consiguiente, es importante distinguir entre los procesos biológicos involucrados en el consumo de oxígeno.

Dado que un respirómetro es un reactor *per se* (en escala reducida), se deben tener en cuenta sus condiciones (hermetismo, homogeneidad) puesto que son



**Figura 2.2:** Relación entre respiración, utilización de sustrato y crecimiento. Modificado de [Vanrolleghem, 2002].

decisivas para la medición. En otras palabras, las condiciones de medición tienen influencia significativa sobre los resultados de la medición (e.g. biomasa, sustrato y tiempo) [Spanjers et al., 1996]. En la práctica, los resultados de medición obtenidos directamente del respirómetro, no se usan en estrategias de control; es necesario que sean transformados primero en variables deducidas. Éstas son variables que resultan del cálculo con otras tasas de respiración medidas u otras variables. Se han propuesto tablas que integran los métodos empleados en los cálculos de estas variables deducidas [Spanjers et al., 1996, Vanrolleghem, 2002].

A pesar de que los métodos respirométricos se consideran el estándar en la medición de la tasa de respiración, algunos detalles deben ser solventados (e.g. en el caso de la deducción de la tasa específica de crecimiento se requiere de una medición de la concentración de biomasa o retrasos con respecto a la respiración dentro del reactor). Para enmendar estos inconvenientes, se proponen esquemas con algoritmos sofisticados para la estimación de parámetros.

## 2.5. Modelado y control de bioprocesos

Es indudable que a nivel mundial la preocupación por garantizar la seguridad de procesos industriales ha obligado a un incremento en regulaciones y normativas, que se ha traducido, en el campo del tratamiento de aguas, en requerimientos de monitoreo especial. Si el monitoreo se lleva a cabo de manera adecuada, resulta conveniente implementar estrategias de control que permitan facilitar la operación de procesos, ahorro sustancial de energía y mano de obra; en otras palabras, el monitoreo provee valiosa información sobre el estado actual de la planta. No obstante, no siempre se puede tener un eficiente conocimiento debido a la brecha que existe en el campo de instrumentación; es decir, no se cuenta con sensores adecuados que cumplan con la tarea, tal como el caso de sensores de nitrógeno (N) y demanda química de oxígeno (DQO) que acarrearán retrasos por su determinación fuera de línea.

### 2.5.1. Importancia del modelado y control

El modelado es de crucial importancia en el diseño de los sistemas de lodos activados, comprensión del metabolismo microbiano y dinámicas poblacionales, y por lo tanto el entendimiento de la respiración [Vanrolleghem, 2002]. La satisfacción de la modelación (y el control) de sistemas depende de los requisitos de optimización, es decir, el proveer mejoras al proceso. Pero, ¿cómo se implementa la optimización (de un proceso) a partir de la modelación? Mediante la creación de modelos representativos, se permite una mejor comprensión de los sistemas dinámicos. En ocasiones resulta conveniente acoplar sistemas entre sí, de manera que se creen métodos híbridos que integren tanto principios determinísticos (ecuaciones que describan el sistema) y de caja negra (conocimiento experto y estadístico).

Tal como se refirió anteriormente, el desafío que se vive día a día es implementar mejoras en los procesos; éstas deben venir principalmente del control de los mismos. En el caso particular de bioprocesos, el aliciente se centra en dotar a los microorganismos de un ambiente favorable para que crezcan, se multipliquen y provean un producto deseado [Alford, 2006]. Un adecuado control de procesos redundará en: la reducción de la variabilidad, mejoras de rendimiento

(productividad), aumento del monitoreo en línea y la capacidad de resolución de problemas, entre otros.

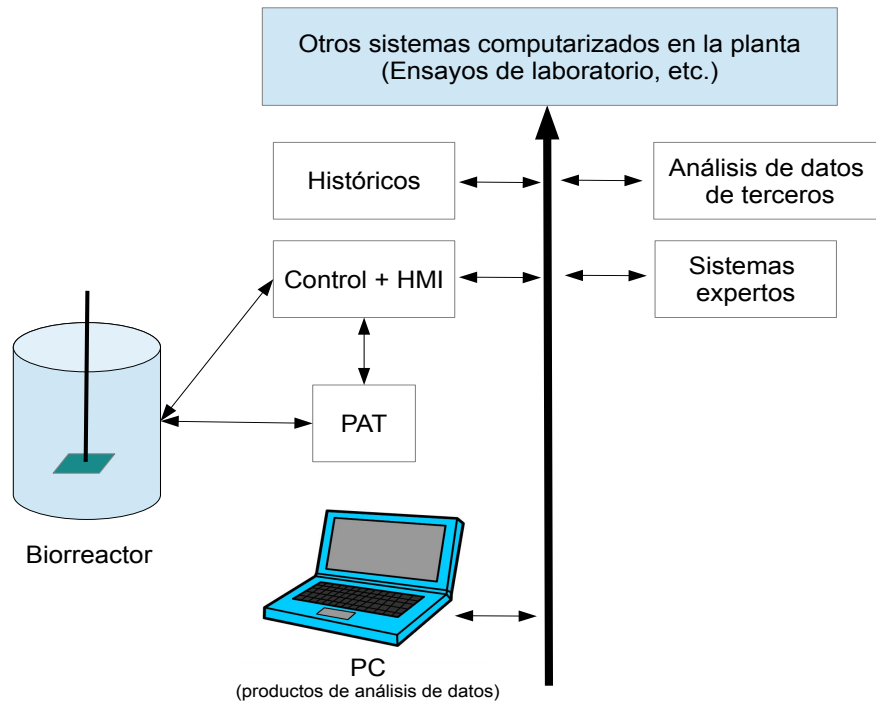
El control en los bioprocesos resulta imprescindible debido a la necesidad de mantener en un valor fijo, uno o más parámetros del proceso tales como el tiempo de retención celular (SRT), el oxígeno disuelto, temperatura y pH. En el tratamiento de aguas, los sistemas son en su mayoría dinámicos y variantes en el tiempo; por lo tanto se requiere de estrategias dinámicas que sean robustas ante los repentinos cambios de las condiciones externas e internas (perturbaciones) [Metcalf & Eddy, 2003]. La aplicación de sistemas de control se lleva a cabo por algoritmos computacionales, con base en una representación del proceso (modelo) y varían de acuerdo a las características inherentes del mismo en: retroalimentación (feed-back), prealimentación (feed-forward), en cascada y adaptados [Spanjers et al., 1996].

### 2.5.2. Generalidades sobre sensores

Como se mencionó en párrafos anteriores, los bioprocesos han tenido una importante evolución en el ámbito del control. Sin embargo, la falta de sensores confiables en bioprocesos es un gran obstáculo para el futuro control, aunado también a que los procesos biológicos resultan muy variables [Chéruy, 1996], y continúa siendo la principal causante de fallas en la operación y en la medición/estimación. Se podría afirmar que si algo no se puede medir, no es posible un control adecuado y robusto cuando el monitoreo es pobre; esto es, cuando los datos obtenidos (que alimentan el modelo) son erróneos o poco reproducibles.

Es menester solucionar el problema. Hoy en día, asociado al avance tecnológico, se cuenta con esquemas más sofisticados y eficientes. Sensores y actuadores se encuentran embebidos en el esquema general del control de una planta; es decir, la tendencia lleva al proceso a integrar (además de los anteriormente mencionados) interfaces de usuario (HMI) más flexibles y amigables de operar, registro histórico de datos, red de área local, sistemas expertos y tecnologías analíticas de procesos (PAT). Estas últimas se encargan de monitorear el estado de un proceso y, manipularlo activamente para mantenerlo en un estado deseado [Dabros et al., 2010] (Figura 2.3).





**Figura 2.3:** Esquema general de los sistemas de control e información en bioprocesos. Modificado de [Alford, 2006].

En el tratamiento de aguas, los sensores se pueden categorizar de dos maneras: on-line y at-line. Dentro de los sensores **on-line** se encuentran los de temperatura, flujo, oxígeno disuelto, pH, etcétera. Esta categoría compone herramientas indispensables en el control; sin embargo, se encuentran dificultades con respecto a sus necesidades, es decir, que puedan operar con seguridad en ambientes hostiles, mantener la calibración por largos periodos de tiempo e, interpretar fielmente la salida. Esta clase de sensores son los más utilizados al implementar lazos de control en tiempo real. Por otro lado, los sensores **at-line** se caracterizan por su gran tamaño, alto costo y por proporcionar valores periódicos de procesos importantes (pseudo en línea). Como desventajas, se tienen el muestreo (y preparación de muestras) manual y aún más importante, su frecuencia de medición imposibilita el control retroalimentado o de lazo cerrado<sup>2</sup>.

Los sensores de oxígeno disuelto (DO) destacan entre los on-line. Estos

<sup>2</sup>En donde se tiene control sobre la salida. En contraste, en un lazo abierto no se tiene dicho control; la relación es directa.

son los más utilizados en procesos aerobios, en virtud de su fidelidad, confianza de medición y bajo costo. El control de DO es esencial debido a que una variación grave produciría cambios metabólicos no deseados: en el mejor de los casos, ralentizar/disminuir la actividad; en el peor, detenerla.

El avance tecnológico ha permitido también a los sensores reducir considerablemente su tamaño, haciéndolos más sencillos de integrar y más rápidos para transmitir información, incluso sobre su propio mantenimiento. No obstante, continúan existiendo variables que no pueden ser medidas con facilidad. La alternativa a esto recae en la predicción de variables y parámetros que resultan complicados de medir directa y continuamente mediante algoritmos convencionales.

### 2.5.3. Sistemas de control experto

Los bioprocesos (e.g. el tratamiento de aguas residuales) son de carácter altamente no lineal; esto representa una dificultad al proponer los modelos adecuados. Una opción es hacer uso de sistemas de control inteligentes que permitan predecir y aproximar sistemas no lineales sin requerir de cálculos o modelos matemáticos precisos. Estos sistemas se consideran como de caja negra dentro del campo de control, puesto que no se tiene conocimiento de lo que hay dentro de sí mismos, pero gozan de un creciente uso en el control de bioprocesos en virtud a su relativa simplicidad de programación y operación.

Entre este tipo de sistemas se encuentran las redes neuronales artificiales (ANN), con sus propiedades de aprendizaje y el control por lógica difusa (FLC) [Schügerl, 2001, Alford, 2006, Polit et al., 2001, Ming-zhi Huang et al., 2010], cuya aplicación ha resultado en la mejora de la calidad del agua y eficiencias económicas en procesos aerobios (e.g. SBR, aireación, sedimentación secundaria) que las establece como una alternativa de control de procesos. Empero, estos sistemas aun no gozan de total aceptación al no ser del todo robustos. Referente a las ANN, son afectadas por factores como: dificultad de extrapolación y necesidad de prueba-error; en cuanto al FLC, le afectan: su naturaleza semi-empírica, carencia de auto actualización/ajuste (a diferencia de las ANN).

Un nuevo paradigma radica en implementar sistemas híbridos [Alford, 2006]

que integren las características principales de ambos ANN y FLC, a fin de tener un modelo completo que conceda un mejor efecto en el tratamiento de aguas residuales. A partir de este paradigma, se crean las redes neuronales difusas (FNN) [Ming-zhi Huang et al., 2010].

## 2.6. Esquemas de estimación

Las necesidades de optimización de procesos de tratamiento de aguas se ven reflejadas en los requerimientos de calidad (cada vez más estrictos) según las normas de regulación ambiental y las limitantes financieras en la operación de una planta [Dabros et al., 2010]. La falta de sensores, asociada bien sea a inexistencia o a costos, acarrea incertidumbres que conllevan al mal funcionamiento [Schügerl, 2001, Alcaraz & González, 2007]. Por ejemplo, de los casos reportados más recurrentes, se tiene la incertidumbre en el influente; en la actualidad es complejo (o casi imposible) determinar fielmente su composición. El paradigma actual señala acoplar un analizador en el efluente; no obstante, este enfoque no es un indicador fiel debido a los cambios de concentración y composición con el tiempo. Otro aspecto importante es el mantenimiento de los sensores. La mayoría se ensucian con facilidad y, las acciones de limpieza producen tiempos muertos innecesarios.

Aun cuando han mejorado considerablemente en las últimas décadas, las fallas en sensores persisten y la luz para tipos específicos de mediciones no ha alcanzado un punto clave de desarrollo. Siguen existiendo variables y parámetros, como la concentración celular y viabilidad, que no se pueden monitorear en línea y, de acuerdo con las nuevas y crecientes demandas, resulta imprescindible un monitoreo más eficiente, i.e., que consuma menos tiempo, evite problemas de suciedad (mantenimiento), provea mayor precisión, etc. Por ello, se necesitan alternativas ante las limitaciones tecnológicas, tales que permitan la predicción de estas variables y parámetros imprácticos de medir directa y continuamente.

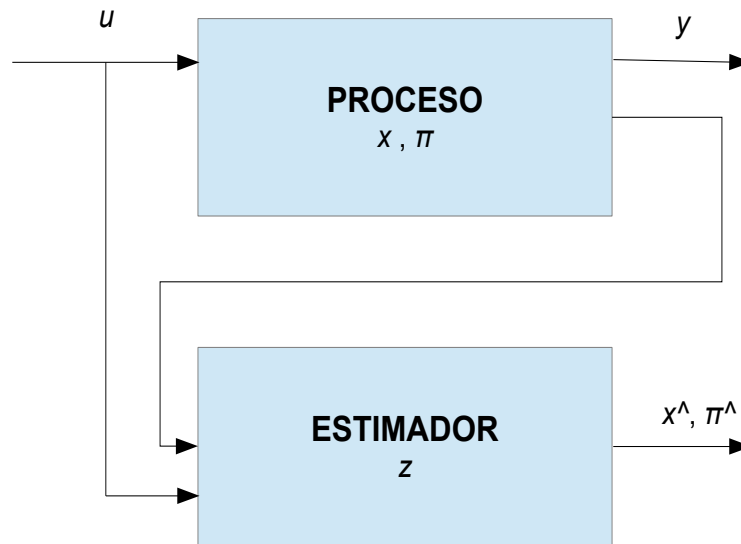
La **estimación de estados** se exhibe como una opción válida para solventar los problemas anteriormente mencionados. El estado del arte en la estimación de estados y control avanzado, indica que, a pesar de que un

considerable número de variables posee la instrumentación adecuada, la mayoría de las mediciones en línea no son precisas. También, el desafío que lleva a usar herramientas de estimación en bioprocesos está en el poco entendimiento que se tiene aún sobre las cinéticas de reacción de algunos procesos, además de las variantes e inciertas perturbaciones [Venkateswarlu, 2004]. En tal caso, se requieren filtros y observadores (o estimadores, o sensores por software) que estimen correctamente las variables desconocidas.

Los **sensores por software** asocian sensores (hardware) y algoritmos de estimación con base en un modelo (software), de manera que exista convergencia a los valores reales sin importar las perturbaciones presentes [Chéruey, 1996]. Por su parte, ofrecen un atractivo paradigma de estimación de estados (variables internas del proceso). En el caso de sistemas aerobios, es posible usar el consumo de oxígeno como la entrada clave [Marsili-Libelli & Vaggi, 1997]. Sistemáticamente, un sensor por software es un modelo reducido compuesto por ecuaciones diferenciales que describen al sistema. Las entradas del sensor por software son las entradas del proceso (variables de control y perturbaciones medidas) y las mediciones en línea disponibles del mismo; la salida del observador corresponde a los estimados de aquellas variables no medidas (Figura 2.4).

La estimación por medio de observadores, es un tipo de control avanzado de variables del proceso evaluadas indirectamente. En comparación con algunos estándares de la industria, la mayoría de los **biosensores** (transductores químico/biológicos) se ven opacados en cuestión de sensibilidad y necesidad de procesamiento de muestras (e.g. diluciones) [Schügerl, 2001]. Sin embargo, estimar no es tan sencillo como parece. La estimación para sistemas lineales, ha estado bien establecida desde finales de la década de los setentas; pero para sistemas no lineales, tal como los bioprocesos, ha representado (y continúa siendo) un gran reto. Aunado a esto, es interesante considerar que algunos esquemas de observación son más robustos que otros, i.e., un observador requiere de mayor conocimiento/información (respecto a otro) del sistema para ser aplicable. En [Alcaraz & González, 2007] se proporciona una revisión comparativa de los enfoques de estimación utilizados en bioprocesos con sus respectivas ventajas y desventajas.

Ahora bien, aun cuando existan todos estos avances y se tomen en cuenta



**Figura 2.4:** Esquema de general de estimación ( $x$ : variables de estado,  $\pi$ : parámetros,  $z$ : variables auxiliares,  $\hat{\cdot}$ : estimados).

las ventajas de usar sensores por software, su aplicación llega a verse comprometida debido a la posición conservadora en la que operan las compañías [Alford, 2006]. El encargado del proceso tiene conocimiento de las tendencias actuales en el ramo, pero no será el primero en inclinarse por implementar sensores virtuales. No obstante, poco a poco estos han ido ganando aceptación, habiendo demostrado su utilidad práctica.

Resultados de lo anterior, se pueden encontrar en [Battista et al., 2012], donde, por ejemplo, se emplearon observadores para reconstruir exitosamente la tasa de reacción con datos provenientes de mediciones de biomasa. En [Chéruiy, 1996] se presenta un software aplicado que es capaz de generar las ecuaciones de estimación de un observador, a partir de un modelo y condiciones de conocimiento experto. Otros estudios interesantes se encuentran en [Boukroune et al., 2009], [Vargas et al., 2011], [Dochain & Vanrolleghem, 2001]

En [Venkateswarlu, 2004] se provee un resumen del estado del arte de los métodos más usados para estimación de parámetros y variables involucrados en

---

procesos biotecnológicos (Tabla 2.2). De entre ellos, los métodos por balanceo de ecuaciones son los menos confiables reportados, mientras que los filtros de Kalman extendidos y los métodos basados en observadores tienen alto reconocimiento de eficiencia. No obstante, la implementación de cada método varía de acuerdo con las necesidades y herramientas disponibles del experimentador.

En particular, en este trabajo se propone emplear como sensores por software a observadores por modos deslizantes de segundo y tercer orden, usando el algoritmo super-twisting generalizado [Moreno, 2012b]. Estos esquemas han demostrado su utilidad para estimar tasas de reacción en diferentes bioprocesos [Battista et al., 2012, Mendoza, 2011]. Sin embargo, casi todas las propuestas han sido probadas solo en simulación; este trabajo buscó validar la técnica con datos provenientes de un proceso real.

**Tabla 2.1:** Ventajas y desventajas de diferentes métodos de monitoreo y estimación. Modificado de [Venkateswarlu, 2004]

<b>Método</b>	<b>Conocimiento</b>	<b>Ventajas</b>	<b>Desventajas</b>
Métodos basados en balanceo de ecuaciones	Relaciones de entradas-salidas en forma de ecuaciones empíricas	Cálculos simples con base en modelos aproximados	Estimados poco confiables en presencia de incertidumbres y ruido
Métodos basados en observadores	Modelo matemático	Estimación de estados en sistemas determinísticos	Difícil incorporar perturbaciones estocásticas
Métodos basados en filtros de Kalman	Modelo matemático	Estimación acertada de estados y parámetros	Requiere tiempo y esfuerzo para validar modelos rigurosos
Métodos basados en redes neuronales	Datos heurísticos en forma de correlaciones empíricas no lineales	Buen rendimiento con ruido y datos incompletos	Habilidad de generalización pobre, fuera del rango de entrenamiento
Métodos basados en razonamiento difuso	Conocimiento heurístico en forma de reglas de producción	Alternativas útiles para procesos y complejos, imprecisos y vagos	Requiere buen entendimiento de un proceso para proponer una base de reglas completa

# Capítulo 3

## Metodología

La Figura 3.1 proporciona el enfoque seguido para la realización de la tesis. La estrategia se dividió en tres etapas principales y cada una de ellas, a su vez, se dividió en sub-etapas: cuatro para la primera etapa, dos para la segunda y una para la tercera y última, respectivamente.

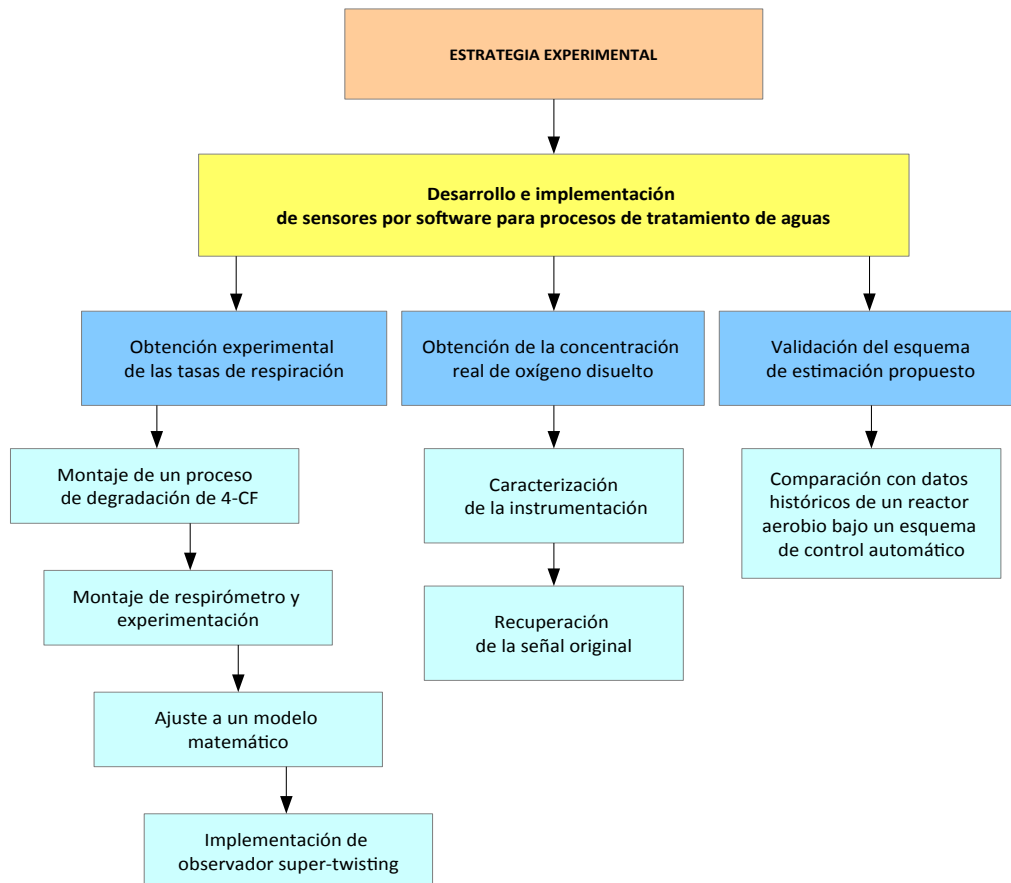
Fundamentalmente, la dirección del trabajo de investigación fue probar el observador super-twisting en un sistema real; entonces, como primera etapa, se requirió obtener experimentalmente las tasas de respiración de un sistema dado. Para ello, se arrancó un biorreactor SBR aerobio que degradaba 4-CF, al cual se le implementó un respirómetro para la medición de la tasa de respiración. Varias corridas experimentales fueron hechas bajo diferentes escenarios. Para corroborar la confiabilidad de los datos obtenidos, se buscó ajustar un modelo matemático que representara el proceso. Por último, se implementó el observador super-twisting. Se desarrollaron los algoritmos y mediante simulaciones se obtuvieron los valores estimados de la tasa de respiración  $\rho(t)$ . Como primera prueba se compararon los resultados del observador y del respirómetro.

En la segunda etapa se obtuvo la concentración real de oxígeno disuelto. En vista de que el oxígeno disuelto era la variable manipulada que permitía al observador estimar, se instrumentó el sistema anterior con sensores de oxígeno disuelto (tanto en el biorreactor, como en el respirómetro). Dichos sensores, siendo sistemas dinámicos, no proporcionaron una medición acertada del DO en el reactor. Por lo tanto, se implementó un observador super-twisting aunado con filtros



digitales que permitieron recuperar y reconstruir la señal verdadera. Entonces, con los datos experimentales de DO y los del respirómetro, se realizaron las pruebas del observador en lazo abierto. Es importante tener en cuenta que los datos proporcionados por el respirómetro no se usaron en el observador, sólo sirvieron para evaluar resultados coherentes por parte de este último.

Finalmente, los datos obtenidos proporcionaron los estimados necesarios para ser comparados con otro esquema. En este caso se utilizaron los datos históricos provenientes de la estrategia de control óptimo dirigido por eventos (ED-TOC) [Moreno et al., 2006], la cual ha demostrado ser robusta y con posibilidad de ser aplicada a nivel industrial.



**Figura 3.1:** Estrategia experimental seguida. Las etapas fueron sucesivas de izquierda a derecha y cada una de sus sub-etapas se ejecutaron también de manera secuencial.

## 3.1. Montaje de un proceso de degradación de 4-clorofenol

Toda la fase experimental se llevó a cabo en el *Laboratorio de Investigación en Procesos Avanzados de Tratamiento de Aguas* (LIPATA) del Instituto de Ingeniería de la Unidad Académica Juriquilla, en Querétaro. Este laboratorio se especializa en el estudio de nuevas tecnologías para el tratamiento de aguas, y se enfoca en la mejora del control de biorreactores, aclimatación y biodegradación de compuestos tóxicos (e.g. fenoles), particularmente 4-clorofenol.

### 3.1.1. Reactor piloto

Para la experimentación se empleó un biorreactor SBR aerobio completamente instrumentado y automatizado. Contaba con una capacidad de 2.5 L, un volumen útil de 2 L y un volumen de intercambio del 50 %. El flujo de aire se controló a 1 L/min por medio de un controlador de flujo másico (Aalborg GFC-17), se operó a la temperatura ambiente dentro del laboratorio ( $\approx 21^\circ\text{C}$ ). Se equipó con un sensor de oxígeno disuelto (Endress + Hauser COS4) con transmisor (Liquisys-M COM223-DX1105). Se utilizaron dos bombas peristálticas fijas para la recirculación (Cole Palmer mod. 7553-80) y el vaciado (Cole Palmer mod. 7553-70) y una variable (Masterflex L/S) para controlar el flujo de entrada. Los tiempos de operación de cada fase del SBR fueron de: (1) preaireación: 5 min; (2) llenado: 2 min; (3) reacción: variable, determinada con base en [Buitrón et al., 2003]; (4) sedimentación: 10-15 min; y tiempo muerto: 2 min.

### 3.1.2. Inóculo

Se inoculó con lodos activados provenientes de una planta de tratamiento de aguas municipales (800 mgVSS/L). Se alimentó con agua sintética conformada de 4-clorofenol (Aldrich, pureza  $\geq 99\%$ ) como única fuente de carbono y energía y, de nutrientes y oligoelementos con base en [AFNOR, 1985]. La solución se mezcló de la siguiente manera: 51 mg/L  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ , 19.44 mg/L  $\text{K}_2\text{HPO}_4$ , 150.9 mg/L  $\text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ , 58.26 mg/L  $\text{NH}_4\text{Cl}$ , 22.5 mg/L  $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ , 36.4 mg/L

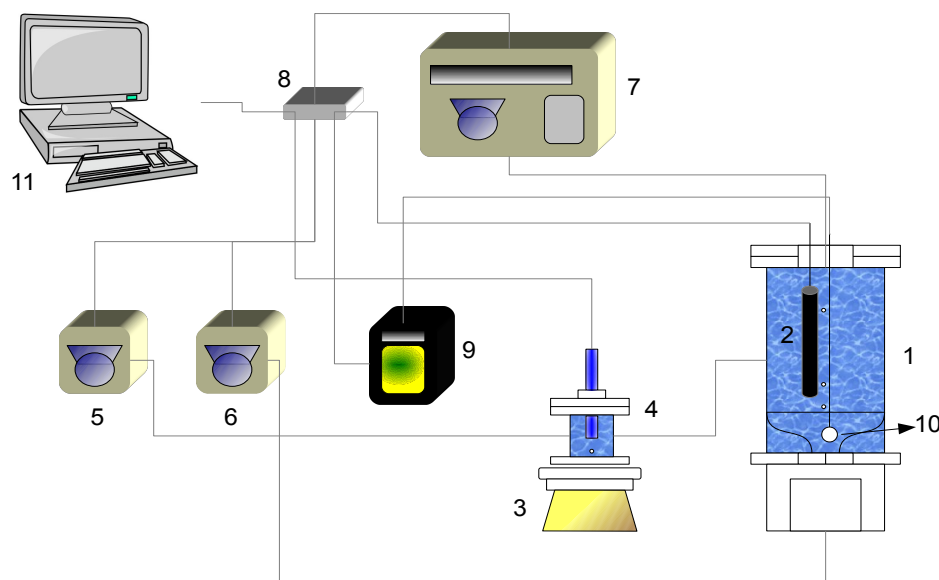
$\text{CaCl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ , 0.25 mg/L  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ; elementos traza:  $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_3\text{BO}_4$ ,  $\text{ZnCl}_2$ ,  $(\text{NH}_4)_6\text{Mo}_7\text{O}_{24}$ , EDTA,  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ . Las Figuras 3.2 y 3.3 muestran una fotografía del reactor y el equipo utilizado, así como el diagrama esquemático del sistema completo, respectivamente.



**Figura 3.2:** Reactor aerobio SBR automatizado.

### 3.1.3. Aclimatación

La aclimatación de la biomasa se llevó a cabo mediante una estrategia de tiempos de reacción variables [Buitrón & Moreno, 2004]. Como se mencionó anteriormente, se inoculó con lodos provenientes de una planta de tratamiento de aguas residuales municipales; esto, debido a la diversidad microbiana propia de dichas aguas. Se empezó con concentraciones de sustrato bajas, e.g. 50 mg<sub>4</sub>-CF/L, y se aumentaron paulatinamente hasta llegar a 200 mg<sub>4</sub>-CF/L. En cuanto a los tiempos de reacción, se fueron reduciendo de acuerdo a la evolución de la aclimatación, desde 40 a 2 h.



**Figura 3.3:** Diagrama esquemático del sistema. Reactor (1), sensor de oxígeno disuelto (2), agitador magnético (3), respirómetro (4), bomba de recirculación (5), bomba de vaciado (6), bomba de alimentación (7), interface (8), controlador de flujo másico (9), difusor de aire (10), PC (11).

### 3.1.4. Técnicas analíticas

#### 3.1.4.1. Fenoles totales

Se tomó una muestra fuera de línea de la concentración de sustrato, es decir, al terminar la reacción; posteriormente se realizó la determinación mediante la técnica colorimétrica de 4-aminoantipirina [APHA, 2005]. La muestra se diluyó en una relación 1:100 y se analizó en un espectrofotómetro HACH ( $\lambda = 500$  nm) con base en una curva de calibración previamente establecida.

#### 3.1.4.2. Sólidos suspendidos volátiles (VSS) y sólidos suspendidos totales (TSS)

Los sólidos suspendidos volátiles y totales se determinaron de acuerdo a los procedimientos señalados en [APHA, 2005], por métodos gravimétricos.

## 3.2. Algoritmos de control e interfaces

Los algoritmos de control referentes al observador super-twisting, simulaciones y condiciones operacionales fueron desarrollados en el software MATLAB 7.1 (Mathworks, inc.). Para el caso de la respirometría se diseñó un instrumento virtual (Figura 3.4) que cumpliera con la función; éste se desarrolló en Labview 7.5 (National Instruments). La operación del reactor y el sistema en sí, se ejecutó con base en el sistema de control **BioRec** [Betancur, 2006], propio del LIPATA.

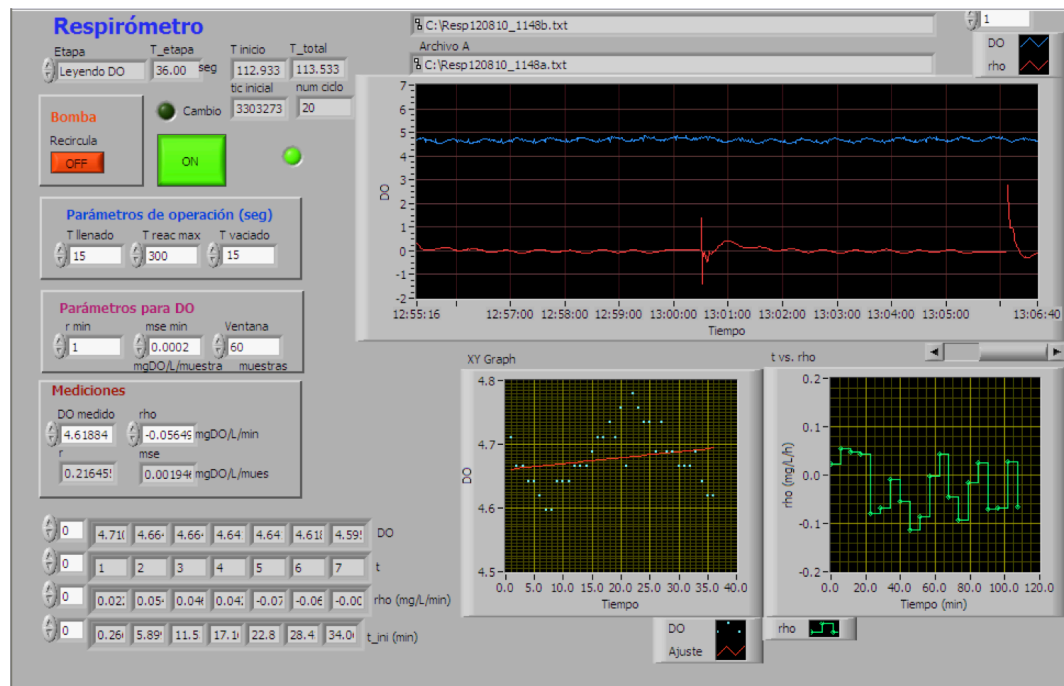


Figura 3.4: Respirómetro, instrumento virtual.

## 3.3. Respirómetro

La respirometría se ejecutó de manera que fuese lo menos invasiva posible para el biorreactor. Se construyó un respirómetro completamente hermético con una capacidad de 50 mL, un volumen útil de 40 mL aproximadamente, y un sensor de oxígeno disuelto (Mettler Toledo O2 4050e) conectado a una tarjeta de adquisición de datos (National Instruments NI USB-6008).

Para cada medición se tomaba una muestra del reactor y se medía el oxígeno disuelto durante 300 s sin añadir oxígeno adicional. Una vez transcurridos los 5 min, se tomaba como tasa de respiración la pendiente de la señal de DO entre los uno y cuatro minutos de reacción en el respirómetro. La señal en este periodo resultó siempre parecida a una recta. Después de este tiempo se regresaba la muestra al reactor. El licor se mantuvo homogéneo mediante el mezclado con un agitador magnético.

### 3.3.1. Montaje y experimentación

El respirómetro se montó paralelo al biorreactor. Las corridas se ejecutaron bajo tres modos de operación (batch, pulse-batch y fed-batch).

#### 3.3.1.1. Batch

En el caso de la operación por lotes convencional; se llenó rápidamente ( $\approx$  3-5 min) hasta alcanzar el volumen máximo (2 L) y se dejó terminar la reacción. Esta última tuvo una duración de 1.5 h particularmente.

#### 3.3.1.2. Pulse-batch

Empezó el llenando con un pulso de 250 mL y se dejó actuar por 0.5 h. Se inyectó un nuevo pulso ya que la baja concentración de sustrato es degradada rápidamente por la biomasa. Se inyectaron un par de pulsos más hasta alcanzar el volumen máximo. Por lo tanto, se requirieron 2 h para finalizar este experimento, dadas las condiciones de llenado y tiempos de sub-reacción<sup>1</sup>.

#### 3.3.1.3. Fed-batch

Inicialmente el flujo de entrada fue muy bajo, inclusive el mínimo manejable por los actuadores (1.7 L/h). Paulatinamente, el flujo fue variante hasta alcanzar el volumen máximo. Este modo se operó con diferentes niveles de concentración de sustrato y, por lo tanto, con tasas de respiración muy variables. El experimento

---

<sup>1</sup>Cada pulso de sustrato fue considerado como una sub-reacción.

finalizaba el llenado en 0.5 h aproximadamente y dependía de qué tan alto o bajo hubiera sido el flujo de entrada. La reacción terminaba en 1.5 h.

# Capítulo 4

## Resultados y discusión

### 4.1. Etapa 1

#### Obtención de las tasas de respiración

##### 4.1.1. Descripción del esquema de estimación

###### 4.1.1.1. Generalidades

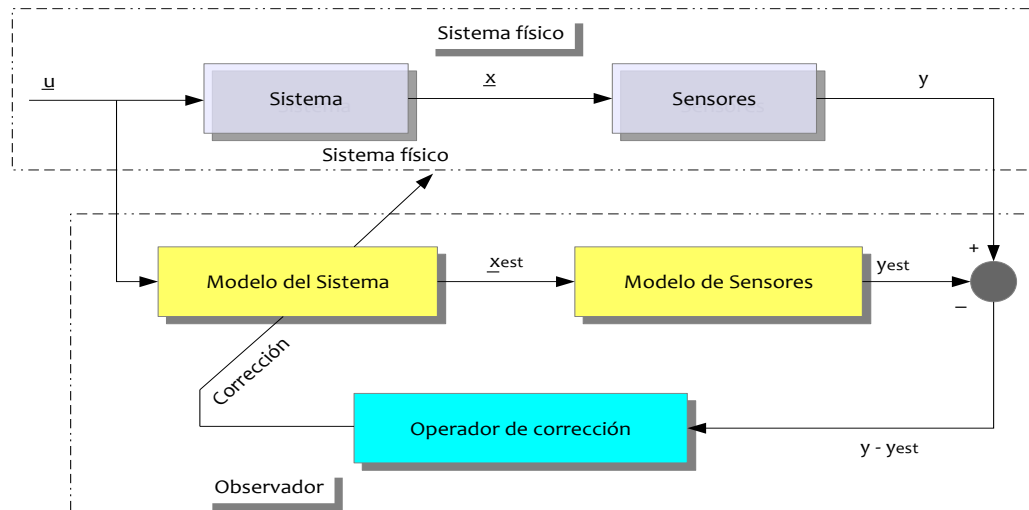
Antes de entrar en detalle, conviene revisar el concepto de un observador. La Figura 4.1, la cual exhibe esquemáticamente el *modus operandi* en general.

En la figura,  $u$  representa las variables de entrada,  $x$  las variables internas o estados y,  $y$  las salidas. También se tiene que  $x_{est} = \hat{x}$  son los estados estimados<sup>1</sup>,  $y_{est} = \hat{y}$  las salidas estimadas y  $y - \hat{y} = e$  es el error de observación. Se aprecia que el observador es una representación de la realidad, es decir, es un modelo tanto de la planta como de los sensores usados en la medición y, aunado a esto, se encuentra un operador de corrección. El objetivo del observador es leer, comparar (la salida real con la estimada) y corregir hasta que la salida predicha se parezca a la real. Si se cumple en el modelo, la propiedad de observabilidad, y las salidas se aproximan ( $e \rightarrow 0$ ), entonces es válido inferir que las variables internas estimadas tiendan hacia aquellas que no se pueden medir ( $\hat{x} \rightarrow x$ ). En el caso particular, cuando  $e(t) \rightarrow 0$  ( $e = \rho - \hat{\rho}$ ), se tendrá que  $\hat{\rho}(t) \rightarrow \rho$ .

---

<sup>1</sup>Es común usar la notación “^” para denotar los estimados.





**Figura 4.1:** Esquema del diseño de un observador. Se utilizó la notación “ $est$ ” como referencia a valores estimados.

Varios tipos de observadores requieren de un conocimiento parcial o incluso perfecto del sistema [Alcaraz & González, 2007, Boukroune et al., 2009, Dochain, 2003, Lafont et al., 2011]. Sin embargo, la ventaja del observador super-twisting propuesto, basado en los modos deslizantes, es que no requiere dicho conocimiento. Es robusto, relativamente sencillo de implementar (ecuaciones que ajustan un modelo), tiene propiedades de convergencia en tiempo finito y alta velocidad de respuesta. Todo lo anterior hace que se perfila como una atractiva disyuntiva a la respirometría.

#### 4.1.1.2. Modelo matemático

En el modelado de sistemas biotecnológicos es común realizar y encontrar suposiciones respecto a estos. El objetivo de dichas suposiciones es facilitar el diseño, tal que las simulaciones sean comprensibles y confiables al comportamiento natural del sistema, permitiendo el control adecuado del mismo. En la práctica, estos sistemas pueden comprender una o varias reacciones y, por lo tanto, las tasas de reacción pueden ser todas diferentes y podrían depender de otro estado (biomasa ( $X$ ), volumen ( $V$ ) y, productos o sustratos intermedarios ( $P_i$ )). En consecuencia, se plantean algunas suposiciones, como considerar que la dinámica del sustrato

( $S$ ) es mucho más rápida que las dinámicas de otros componentes ( $X$  y  $P_i$ ). Lo anterior hace posible suponer que todas las tasas de reacción específicas durante la reacción son dependientes únicamente del sustrato, es decir

$$\mu_S \approx \mu_S(S), \quad \mu_X \approx \mu_X(S), \quad \mu_{P_i} \approx \mu_{P_i}(S). \quad (4.1)$$

La señal de salida medida puede depender del estado completo, pero durante los transitorios que son de interés, también puede considerarse dependiente únicamente del sustrato (la biomasa se asume prácticamente constante):

$$y = \mu_y(S)X.$$

La función  $\mu_y(S)$  tiene un único máximo o mínimo que se denota como  $\mu_y^*$ , en  $S = S^*$ . Esta es la suposición crucial, la cual implica que su derivada,  $\mu_y'(S)$ , en  $S < S^*$  tiene signo opuesto a  $\mu_y'(S)$  en  $S > S^*$  y es cero únicamente en  $S = S^*$ .

El caso anterior se ejemplifica en un biorreactor con únicamente un sustrato y una reacción, usado para tratar agua residual tóxica. De hecho, si la dinámica del sustrato es más rápida que el resto (incluida la biomasa) por intervalos de tiempo lo suficientemente cortos, podemos asumir los demás estados como parámetros que varían lentamente en el tiempo y, por lo tanto, el sistema se puede estructurar de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \dot{S} &= -r_S(S) + (S_{in} - S)u, \\ y_{control} &= k_y r_y(S, r_y^*). \end{aligned} \quad (4.2)$$

siendo  $u = Q/V$  la tasa de dilución, y en donde  $y_{control}$  es la variable a controlar. Hay un parámetro crítico que cambia lentamente:  $r_y^*(t) = \mu_y^* X(t)$ , el cual define un máximo positivo  $y^*(t) = k_y r_S(S^*(t))$  con respecto a  $S$ . Debe observarse que ambos  $r_S = \mu_S X$  y  $r_y = \mu_y X$  tienen parámetros que cambian lentamente. Resulta interesante medir  $y(t)$  porque podría resultar atractivo hacer que siga a  $y^*(t) = k_y r_y^*(t)$  usando solamente mediciones de  $y$  sin el conocimiento explícito de  $r_y^*(t)$  u otros parámetros, aún sin el conocimiento exacto de la función  $r_S$ .

Controlar un sistema como el descrito no es tarea sencilla, en especial usando únicamente la información de la salida anteriormente enunciada. Para

lograr esto, es necesario en primera instancia construir dicha salida; por tal motivo se recurre a la observación de estados. No obstante, el objetivo de este trabajo no es el desarrollo de la estrategia de control, sino enfocarse a la estimación correcta de la variable de interés mediante el observador super-twisting. En todo caso, la discusión acerca del controlador sirve como motivación para proyectos futuros.

#### 4.1.1.3. Un observador super-twisting

Un controlador de salida retroalimentada tratará de mantener la salida en su máximo [Betancur et al., 2004]. Sin embargo, puede darse que la medición de esta función de salida no esté disponible. Por lo tanto, se debe diseñar un observador que estime  $y_{control}$ . Un caso típico es un reactor fed-batch, en donde  $y_{control}$  corresponde a la tasa específica de biodegradación  $\mu_S$ .

$$\begin{aligned}\dot{S} &= -\mu_S X + (S_{in} - S)Q/V, \\ \dot{X} &= \mu_X X - XQ/V, \\ \dot{V} &= Q.\end{aligned}\tag{4.3}$$

Considerando el modelo (3.3) y añadiendo la siguiente ecuación diferencial para el oxígeno disuelto  $C(t)$ , el cual sí puede ser medido en línea, se tiene:

$$\dot{C} = -\underbrace{(k_c \mu_S + b)}_{\rho} X - CQ/V + (C_{sat} - C)k_L a.\tag{4.4}$$

Se nota que la tasa de respiración  $\rho = k_c \mu_S + b$  se compone de dos términos: la tasa de respiración endógena  $b$  y la tasa de respiración metabólica  $k_c \mu_S$ , que es proporcional a la tasa específica de biodegradación  $\mu_S$ . Por lo tanto, el objetivo del control al mantener  $\mu_S$  en su máximo es equivalente a mantener  $\rho$  en su máximo, ya que:

$$\mu_S = \frac{1}{k_c} \rho - \frac{b}{k_c}.$$

Siendo  $XV$  la cantidad total de biomasa, la cual cambia lentamente comparada con el cambio de las demás variables en el reactor; se asume  $X(t)V(t)$  constante, es decir, que la biomasa no crece o crece muy lentamente como para ser considerada constante; entonces  $X(t) = X_0 V_0 / V(t)$ . También se asume constante

a  $\frac{b}{k_c}$ , por lo que el máximo de  $\rho$  coincide con el máximo de  $\mu(s)$ . De lo anterior se puede definir

$$\rho X = \rho X_0 \frac{V_0}{V}, \quad y \quad \frac{Q}{V} = \frac{Q}{V_0} \frac{V_0}{V}.$$

Proponiendo las siguientes definiciones, se puede transformar (4.4) de manera que sea más útil para el diseño del estimador. Sea

$$x_1 = \frac{CV}{X_0 V_0}.$$

Entonces su derivada con respecto al tiempo está dada por

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= \dot{C} \left( \frac{V}{X_0 V_0} \right) + \dot{V} \left( \frac{C}{X_0 V_0} \right), \\ &= -\rho \underbrace{\left( \frac{X_0 V_0}{V} \right)}_X \left( \frac{V}{X_0 V_0} \right) - C \left( \frac{Q}{V} \right) \left( \frac{V}{X_0 V_0} \right) + (C_{sat} - C) k_L a \left( \frac{V}{X_0 V_0} \right) + Q \left( \frac{C}{X_0 V_0} \right), \end{aligned}$$

$$\dot{x}_1 = -\rho + (x_{1,sat} - x_1) k_L a.$$

en donde  $x_{1,sat}$  ya no es constante, debido a que  $x_{1,sat}(t) = C_{sat}/(V_0 X_0)V(t)$ ;  $k_L a$ , el coeficiente de transferencia másica, también puede ser variante en el tiempo, al depender del flujo de aire dentro del reactor. Hay que notar que se puede medir  $x_1$ , pero no se conoce  $\rho(t)$ . Un observador será capaz de estimar esta señal en línea.

Un observador es un sistema paralelo a la planta, que pretende estimar sus estados usando la información disponible de las mediciones en línea y un modelo matemático. En este caso, el objetivo es estimar  $\rho$  sin un conocimiento de ésta, excepto por el hecho de que su derivada en el tiempo está delimitada. Sea  $x_2 = -\rho$  y  $\dot{\rho} = \delta_2(t)$ , donde  $\delta_2$  es una señal de tiempo desconocida que satisface  $|\delta_2(t)| \leq C_2$  para algún valor  $C_2 \geq 0$ . Entonces

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2 + (x_{1,sat} - x_1) k_L a - \delta_1, \\ \dot{x}_2 &= -\delta_2. \end{aligned} \tag{4.5}$$

Nótese que  $\delta_2(t)$  captura la incertidumbre que se tiene acerca de  $\rho(t)$ , la cual puede ser cualquier señal, mientras que  $\delta_1(t)$  captura la incertidumbre que se

tiene acerca de  $x_{1,sat}(t)$ ,  $x_1(t)$ , o  $k_L a(t)$ . Al implementar el observador, en realidad no se tiene conocimiento de los valores exactos de estos parámetros y señales, aun si las mediciones son precisas. En la implementación del observador se usan realmente valores *estimados*  $\hat{x}_{1,sat}(t)$  y  $\hat{k}_L a(t)$  y, algunas mediciones  $x_{1,meas}(t)$ , las cuales no necesariamente son iguales a sus valores *reales*; por lo tanto

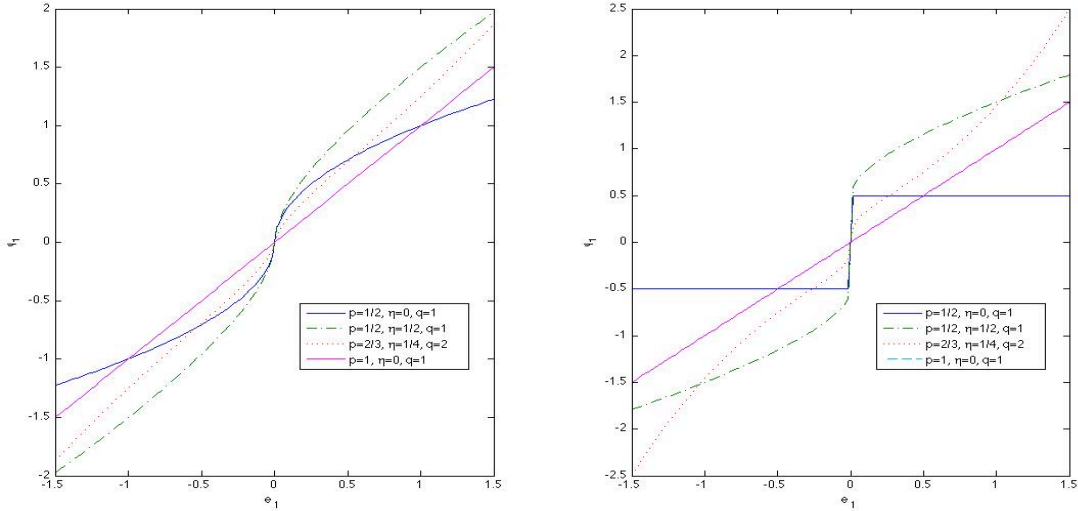
$$\delta_1(t) = (x_{1,sat} - x_1) k_L a - (\hat{x}_{1,sat} - x_{1,meas}) \hat{k}_L a. \quad (4.6)$$

El observador super-twisting propuesto tiene la siguiente forma [Mendoza, 2011]:

$$\begin{aligned} \dot{\hat{x}}_1 &= \hat{x}_2 + (x_{1,sat} - x_1) k_L a - l_1 \phi_1(e_1), \\ \dot{\hat{x}}_2 &= -l_2 \phi_2(e_1), \end{aligned} \quad (4.7)$$

en donde  $e_1 = \hat{x}_1 - x_1$  es el error de medición y  $e_2 = \hat{x}_2 - x_2$  representa el error de observación para  $\rho$ . Las funciones  $\phi_1$  y  $\phi_2$  están dadas por

$$\begin{aligned} \phi_1(e_1) &= |e_1|^p \text{sign}(e_1) + \eta |e_1|^q \text{sign}(e_1), \\ \phi_2(e_1) &= p |e_1|^{2p-1} \text{sign}(e_1) + \eta(p+q) |e_1|^{p+q-1} \text{sign}(e_1) + \eta^2 q |e_1|^{2q-1} \text{sign}(e_1) = \phi_1 \phi_1'. \end{aligned} \quad (4.8)$$



**Figura 4.2:** Representación del error  $e_1$  en función de  $\phi_1$ .

Donde  $q \geq 1 \geq p \geq \frac{1}{2}$  y  $\eta \geq 0$  son los parámetros de diseño. En la Figura

4.2 se muestra que las funciones  $\psi_p(e_1) = |e_1|^p \text{sign}(e_1)$  son funciones continuas para cualquier  $p \geq \frac{1}{2}$  (rojo, puntos) y además  $\psi_p(-e_1) = -\psi_p(e_1)$ . También hay que notar que la función  $\phi_1$  puede hacerse lineal si  $p = 1$  y  $\eta = 0$  (magenta); y se obtiene el algoritmo super-twisting clásico si  $p = \frac{1}{2}$  y  $\eta = 0$  (azul). Si  $\eta \geq 0$  se conduce a un término adicional en el algoritmo super-twisting usual; por ejemplo, uno lineal cuando  $p = \frac{1}{2}$  y  $q = 1$  (verde, rayas). Para propósitos de análisis, es interesante notar que

$$\phi_2(e_1) = \phi_1(e_1) \cdot \phi_1'(e_1), \quad \phi_1' = \frac{d\phi_1}{de_1} = p|e_1|^{p-1} + \eta q|e_1|^{q-1}. \quad (4.9)$$

Las dinámicas del error de observación están dadas por

$$\begin{aligned} \dot{e}_1 &= -l_1\phi_1(e_1) + e_2 + \delta_1, \\ \dot{e}_2 &= -l_2\phi_2(e_1) + \delta_2. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Se ha demostrado que este observador converge en tiempo finito cuando la sintonización de las ganancias  $l_1$  y  $l_2$  es adecuada [Moreno, 2012b, Dávila et al., 2010], y las dos perturbaciones  $\delta_1$  y  $\delta_2$  cumplen la siguiente restricción:

$$\begin{aligned} |\delta_1| &\leq g_1|\phi_1(e_1)| \\ |\delta_2| &\leq g_2|\phi_2(e_1)|, \end{aligned} \quad (4.11)$$

para dos funciones no negativas  $g_1(t)$  y  $g_2(t)$ . Esto implica que cuando  $e_1 = 0$ , la perturbación  $\delta_1$  debe ser cero, lo cual es casi imposible de asegurar. Sin embargo, si  $\delta_2$  es acotado, sí se satisface cuando  $p = \frac{1}{2}$ . Para ello, basta con suponer que  $|\delta_2(t)| \leq \frac{g_2}{2}$  para todo  $t$  y con  $g_2 > 0$ .

#### 4.1.1.4. Observador super-twisting para estimación de la entrada

Otro problema que aparecerá es el hecho de que la medición de oxígeno disuelto será por medio de un sensor y éste es también un sistema dinámico. Además, la señal de DO probablemente va a estar contaminada con ruido, haciendo necesaria la implementación de un filtro antes de usar esa señal. Esto llevará a que la señal

de DO *medida*  $y(t)$  no será la concentración de DO real  $C(t)$ , y es un hecho que esto puede tener un efecto en la implementación previa del observador. En todo caso, dado un modelo que explique  $y(t)$ , es posible implementar un estimador para la verdadera concentración de DO en el reactor, es decir, una señal  $\hat{C}(t)$  que sea usada en el observador para estimar  $\rho$ .

Se supondrá que la relación entre  $u(t) = C(t)$  y  $y(t)$  está dada por el siguiente sistema de segundo orden:

$$\tau^2 \ddot{y}(t) + 2\zeta\tau \dot{y}(t) + y(t) = ku(t), \quad (4.12)$$

en donde  $\tau$  y  $\zeta$  son parámetros constantes positivos. Con  $k \approx 1$  (usualmente), este filtro tiene la siguiente realización en el espacio de estados.

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_1 &= \xi_2 - (2\zeta/\tau)\xi_1, & \xi_1 &= \tau^2 y, \\ \dot{\xi}_2 &= ku - (1/\tau^2)\xi_1, & \xi_2 &= \tau^2 \dot{y} + 2\zeta\tau y, \\ y &= \tau^2 \xi_1. \end{aligned}$$

Ahora se define  $\xi_3 = ku$  y se asumen desconocidas las dinámicas para  $\xi_3$ , tal que es posible re-escribir el sistema anterior como:

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_1 &= \xi_2 - (2\zeta\tau)y, \\ \dot{\xi}_2 &= \xi_3 - y, \\ \dot{\xi}_3 &= -\delta. \end{aligned}$$

Entonces, es factible proponer el siguiente observador super-twisting de tercer orden

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\xi}}_1 &= -l_1 |e_1|^{2/3} \text{sign}(e_1) + \hat{\xi}_2 - (2\zeta\tau)y, & e_1 &= \hat{\xi}_1 - \tau^2 y, \\ \dot{\hat{\xi}}_2 &= -l_2 |e_1|^{1/3} \text{sign}(e_1) + \hat{\xi}_3 - y, \\ \dot{\hat{\xi}}_3 &= -l_3 \text{sign}(e_1), & \hat{u} &= \hat{\xi}_3/k. \end{aligned}$$

El error del sistema con  $e_i = \hat{\xi}_i - \xi_i$ ,  $i = \{1, 2, 3\}$  está dado por

$$\begin{aligned}\dot{e}_1 &= -l_1|e_1|^{2/3} \text{sign}(e_1) + e_2, \\ \dot{e}_2 &= -l_2|e_1|^{1/3} \text{sign}(e_1) + e_3, \\ \dot{e}_3 &= -l_3 \text{sign}(e_1) + \delta.\end{aligned}$$

Éste tiene la estructura de un algoritmo super-twisting de tercer orden y se ha demostrado que bajo la sintonización correcta de  $l_1$ ,  $l_2$  y  $l_3$ , lleva a una convergencia en tiempo finito de  $e_i$  a cero, aun a pesar de perturbaciones persistentes y acotadas  $\delta(t)$  [Moreno, 2012a]. Por lo tanto, debido que esto implica que  $\hat{\xi}_3 \rightarrow \xi_3$  en tiempo finito, se tiene también que  $\hat{u}(t) \rightarrow u(t)$  en el mismo tiempo finito. Así, se ha diseñado un estimador de la entrada para un filtro de segundo orden, dada su señal de salida.

#### 4.1.2. Ajuste al modelo

Los procedimientos anteriores están dirigidos a construir un observador sin conocimiento explícito de la tasa de consumo de sustrato  $r_S(S)$  de la ecuación (4.2). No obstante, para probar el diseño del observador, puede ser útil ajustar datos que han sido colectados (oxígeno disuelto) a un determinado modelo. Aquí se propone una forma de lograr esto.

Con este fin, hay que enfocarse en el caso explicado anteriormente, donde los datos colectados han sido una señal medida  $y(t)$  que corresponde a la salida de la concentración del oxígeno disuelto de un sensor, que ha sido filtrado posteriormente para eliminar algo del ruido de medición. Cabe suponer que se implementa el estimador de entrada y se recupera una señal razonable  $\hat{C}(t)$ , que es un buen estimado de la concentración de DO en el licor mezclado dentro del reactor.

Considérese entonces el siguiente modelo:

$$\begin{aligned}\dot{S} &= -\mu_S(S)X + (S_{in} - S)\frac{Q_{in}}{V}, \\ \dot{C} &= -k_c\mu_S(S)X - bX + (C_{sat} - C)k_La - C\frac{Q_{in}}{V}.\end{aligned}\tag{4.13}$$

Asumiendo que la concentración de biomasa  $X$  cambia únicamente por el cambio de volumen, es decir, la masa de microorganismos es constante, entonces



$XV = X_0V_0$  es constante y, por tanto  $X = X_0(V_0/V)$ . Entonces se puede re-escribir el sistema de arriba como

$$\dot{S} = \left( -\mu_S(S)X_0 + (S_{in} - S)\frac{Q_{in}}{V_0} \right) \underbrace{\left( \frac{V_0}{V} \right)}_{w(t)}, \quad (4.14)$$

$$\dot{C} = -(k_c\mu_S(S)X_0 + bX_0)w + (C_{sat} - C)k_La - C\frac{Q_{in}}{V_0}w.$$

Es importante destacar que la ecuación que define  $S(t)$  no depende de  $C(t)$  y, por otro lado, se ve al sistema que define  $C(t)$  como uno con dos señales de entrada que serían  $w(t) = V_0/V(t)$  y la tasa  $k_c\mu_S(S(t))X_0$ . Entonces, si se tienen datos medidos de  $C(t)$  (en realidad se tendrán estimados dados por  $\hat{C}(t)$  después de usar el estimado de entrada super-twisting) y también se tienen datos de  $Q_{in}(t)$  y  $V(t)$ , faltan precisamente los datos de la tasa. Se propone entonces una metodología para construir un *exo-sistema* que pueda proveer adecuadamente esta señal para simulaciones.

Se definen las siguientes variables auxiliares y se hacen las siguientes definiciones:

$$s = k_cS, \quad s_{in} = k_cS_{in}, \quad u = \frac{Q_{in}}{V_0}, \quad w = \frac{V_0}{V}. \quad (4.15)$$

Primero hay que destacar que la ecuación diferencial para la variable  $w(t)$  es

$$\dot{w} = \frac{d}{dt} \left( \frac{V_0}{V} \right) = \left( -\frac{V_0}{V^2} \right) \dot{V} = - \left( \frac{V_0}{V^2} \right) Q_{in} = - \left( \frac{V_0}{V} \right) \left( \frac{V_0}{V} \right) \left( \frac{Q_{in}}{V_0} \right) = -w^2u. \quad (4.16)$$

También se puede escribir  $\dot{s} = k_c\dot{S}$  y por tanto, de (4.14) se tiene

$$\dot{s} = [-k_c\mu_S(S)X_0 + (s_{in} - s)u] w.$$

Ahora se re-define la función  $\mu_S(S)$  en términos de la nueva variable  $s$ . Sea

$$r_s(s) = k_c\mu_S(s/k_c)X_0. \quad (4.17)$$

para proponer el exo-sistema:

$$\begin{aligned} \dot{w} &= -w^2 u, & w(0) &= 1, \\ \dot{s} &= [-r_s(s) + (s_{in} - s)u] w, & s(0) &= s_0, \\ \psi &= r_s(s). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Dada la condición inicial  $s_0$ , el valor del parámetro  $s_{in}$ , y una forma funcional para  $r_s(s)$  (con algunos parámetros y una estructura particular), se puede generar una señal  $\psi(t)$  como su salida. Entonces, se puede usar la señal  $\psi(t)$  para simular el comportamiento de la concentración del oxígeno disuelto en el biorreactor y comparar el resultado con los datos medidos  $y(t)$ :

$$\begin{aligned} \dot{C}(t) &= [-\psi(t) - bX_0 - C(t)u(t)] w(t) + (C_{sat} - C(t))k_L a, & C(0) &= C_0 \\ \tau^2 \ddot{y}(t) + 2\zeta\tau \dot{y}(t) + y(t) &= C(t). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Para simularlo, es necesario conocer los valores de los cuatro parámetros (e.g.  $k_L a$ ,  $bX_0$ ,  $C_{sat}$ , y  $\tau$ ) y por supuesto, proponer algunas condiciones iniciales. Antes de continuar, he aquí un ejemplo que ilustra una posible forma para la función  $r_s(s)$ . Una forma usual para  $\mu_S(S)$  es la función de Haldane:

$$\mu_S(S) = \frac{\mu^* S S^*}{S S^* + \beta(S - S^*)^2}. \quad (4.20)$$

entonces, definiendo  $s^* = k_c S^*$  y  $r_s^* = k_c \mu^* X_0$ , se observa que la función conserva la misma estructura con tres parámetros para sintonizar

$$r_s(s) = \frac{k_c \mu^* X_0 \frac{s}{k_c} \frac{s^*}{k_c}}{\frac{s}{k_c} \frac{s^*}{k_c} + \beta \left( \frac{s}{k_c} - \frac{s^*}{k_c} \right)^2} = \frac{r_s^* s s^*}{s s^* + \beta(s - s^*)^2}. \quad (4.21)$$

**Obtención de algunos parámetros** Suponiendo que se han realizado varios experimentos, todos ellos usando el mismo valor de  $S_{in}$  (que se conoce o se puede estimar), es posible distinguir dos tipos de experimentos:

**Batch.** En el inicio se llena el reactor al volumen máximo, rápidamente y, el experimento culmina cuando el sustrato ha sido completamente consumido.

**Fed-batch.** Se inicia con casi nada de sustrato en el reactor a un volumen  $V_0$  y se llena, bien sea con velocidad de flujo fija durante algunos periodos, o con pulsos, hasta alcanzar el volumen final  $V_f$ .

En el modo fed-batch, la única posible suposición de momento, es que  $s_0 = 0$  o un valor muy bajo. Sin embargo, para las reacciones en batch se puede obtener mayor información. Se simulará con una condición inicial *después del llenado*, tal que  $w_f = V_0/V_f$  sea constante y  $u$  sea cero. La concentración inicial de sustrato puede ser aproximada por una dilución de  $S_{in}$  si el llenado es muy rápido. De hecho, si el llenado fuese instantáneo, es posible calcular la concentración de sustrato después del llenado como:

$$S_0 = \frac{S_{in}(V_f - V_0) + S_0^- V_0}{V_f} = (1 - w_f)S_{in} + w_f S_0^- \approx (1 - w_f)S_{in}. \quad (4.22)$$

donde  $S_0^-$  es la concentración residual de sustrato antes de llenar. Considerando que en realidad existe algo de consumo de sustrato durante el llenado, se considera que la presencia de un  $S_0^-$  diferente de cero, compensa el sustrato consumido y, la aproximación de la derecha en la ecuación anterior es correcta.

Lo anterior provee un estimado de  $S_{in}$ , pero para simular se necesita un estimado de  $s_{in}$ , el cual implica que es necesario estimar el factor  $k_c$ . Éste puede ser obtenido integrando las ecuaciones (4.13) cuando  $Q_{in} = 0$  y  $S_0 = (1 - w_f)S_{in}$ , suponiendo un valor para la concentración final de sustrato  $S_f$  (cerca de cero).

**Ajuste de datos** Una vez que se tiene una suposición inicial para algunos parámetros críticos, los únicos parámetros restantes son los de la función  $r_s(s)$ . Aún más, se podría *dar forma* a esta función manualmente hasta que se tenga una señal simulada del sistema (4.19) que luce como los datos  $y(t)$ . En un contexto general, la función  $r_s(s)$  dependerá de un conjunto de parámetros  $\theta$ , que determina su “forma” y “altura”. Por ejemplo, en la ley de Haldane, los parámetros  $s^*$  y  $r_s^*$  determinan el punto donde ocurre el máximo, mientras que el parámetro  $\beta$  determina la curvatura (si es “plana” o “puntiaguda” alrededor del máximo). En

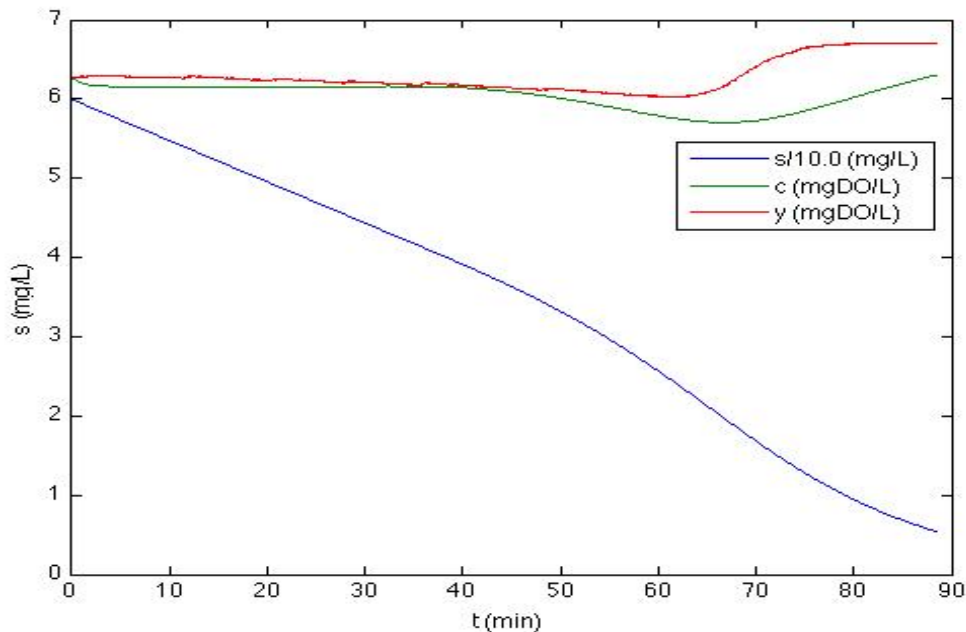
todo caso, se tendrá una tabla de valores de  $s$  vs  $r_s$  disponible para simular el sistema. Para ajustar estos datos, se puede hacer lo siguiente:

1. Proponer un conjunto de parámetros  $\theta$  y simular, para una función de entrada dada  $u(t)$ , el exo-sistema (4.18) para obtener estas señales  $\hat{\psi}(t)$  y  $w(t)$ . Éstas dependerán de la elección de  $s_0$  y  $s_{in}$ .
2. Usando las entradas simuladas y verdaderas  $\hat{\psi}(t)$ ,  $w(t)$  y  $u(t)$ , simular ahora el sistema (4.19) para obtener  $\hat{y}(t)$ . Esta simulación requiere proponer los parámetros  $C_0$ ,  $y_0$ ,  $C_{sat}$ ,  $k_L a$  y  $bX_0$ , así como  $\tau$  y  $\zeta$  (del sensor).
3. Comparar  $y(t)$  (medición) y  $\hat{y}(t)$  (simulación y dependiente de todos los parámetros). Si son similares, termina el proceso. Si no (lo más probable), se necesitan modificar algunos parámetros y repetir el proceso.

### 4.1.3. Ajuste experimental del modelo de reacción

Una vez generados y obtenidos los datos provenientes del sistema real bajo los diferentes escenarios planteados anteriormente mediante respirometría, se procedió a validar la confiabilidad de estos. Tal y como se mencionó anteriormente, al modelar el sistema se tiene en cuenta que para un sustrato como el 4-clorofenol, las cinéticas son de tipo Haldane [Moreno et al., 2006]; por tanto, se esperaban variaciones significativas en la operación por lotes. El objetivo básico de este modelo buscó ajustar los datos experimentales con cierta correlación. A continuación se presentan dos de los experimentos (de diferente tipo), de los cuales se encontraron los resultados que mejor aproximaron.

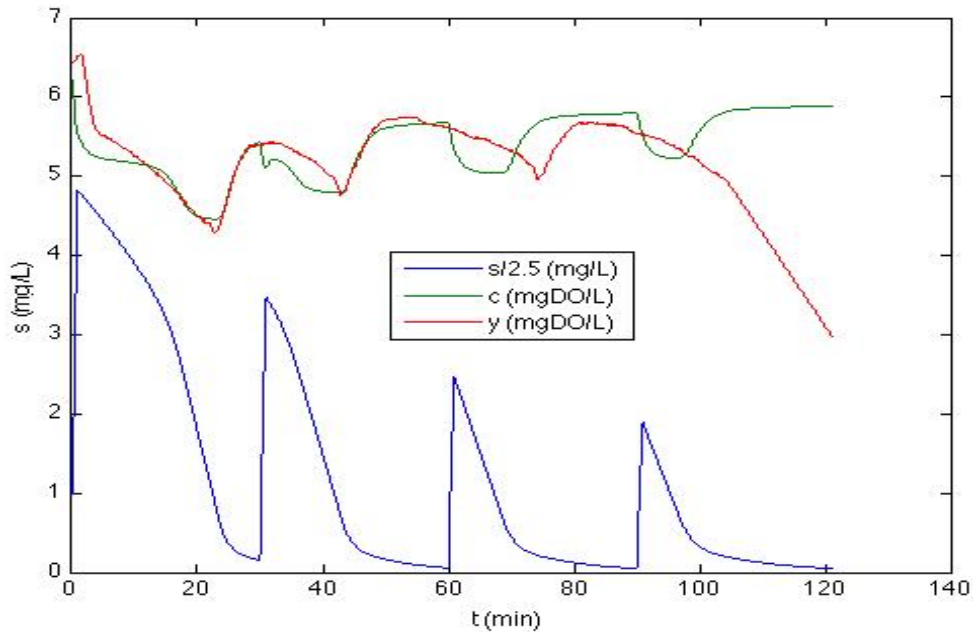
El procedimiento consistió en recuperar datos de las mediciones como  $S_{in}$ ,  $t$ ,  $Q_{in}$ , DO y  $D_{in}$ , para generar el modelo. La cinética se diseñó de forma manual y se modificó empíricamente para obtener una señal congruente. Posteriormente se modificaron los parámetros  $C_{sat}$ ,  $k_L a$  y  $bX_0$  a manera de sintonización. La Figura 4.3 representa el experimento de batch convencional; en donde  $s$  (azul) es la concentración de sustrato,  $c$  (verde) la concentración de oxígeno disuelto propuesta por el modelo, y  $y$  (rojo) la concentración de oxígeno disuelto obtenida de la medición del sensor.



**Figura 4.3:** Experimento en batch.

En ella se aprecia la duración del lote aproximada de 90 min. Nótese que  $s$  se encuentra escalada una décima parte, con fines prácticos al graficar. También se observa cómo la señal propuesta  $c$  siguió la tendencia aunque su ajuste no fuera perfecto. En todo caso es notoria la falta de reproducibilidad de la cinética de Haldane. En otras palabras, el DO debió haber disminuido a valores mucho menores ( $\approx 3$  mg/L) debido a la actividad microbiana, y subir rápidamente a la saturación. La falta se le atribuye a inconvenientes con la instrumentación y el software de control.

Como desenlace, en la Figura 4.4 se operó en el modo por pulsos y se aprecia un poco mejor la tendencia del modelo  $c$  hacia los datos experimentales i.e., los pulsos en los que se alimentó el reactor son ajustados por el modelo, aunque sin convergencia al final. En esta oportunidad, la concentración de sustrato está escalada 2.5 veces y lo más importante, es evidente el cambio en  $s$  conforme se dan los cambios (bien efectuados) en el DO.



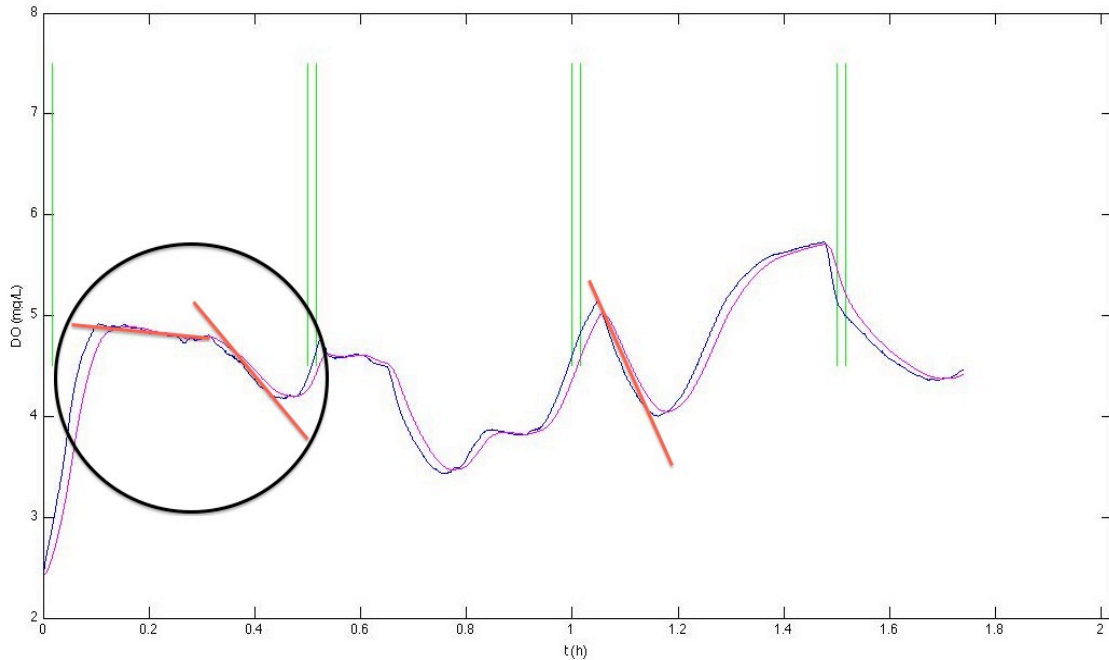
**Figura 4.4:** Experimento en pulse-batch.

Como *addendum*, es apreciable que el modelo propuesto presenta cierto ajuste para el experimento en pulsos (pulse-batch); sin embargo, en el caso contrario (e.g. batch) no fue posible conseguir el ajuste deseado. Lo importante a destacar de esta sección es que la tasa de consumo de sustrato no parece seguir el modelo esperado. Esto indica que no siempre será posible usar un observador no robusto, el cual requiera un modelo complejo de la tasa de consumo.

#### 4.1.4. Prueba del observador

En vista de que los resultados de la sección anterior con un modelo no resultaron satisfactorios, se dio la necesidad de optar por un esquema más robusto. En esta sección se evalúa la eficacia del observador super-twisting con los datos experimentales. El primer paso consistió en decidir qué tipo de experimento convendría usar para recuperar los datos. Se escogió un pulse-batch, que es el que aparenta ajustarse mejor a lo que sucede en un SBR con 4-CF. La Figura 4.5 muestra la evolución del oxígeno disuelto y los instantes en los que hubo

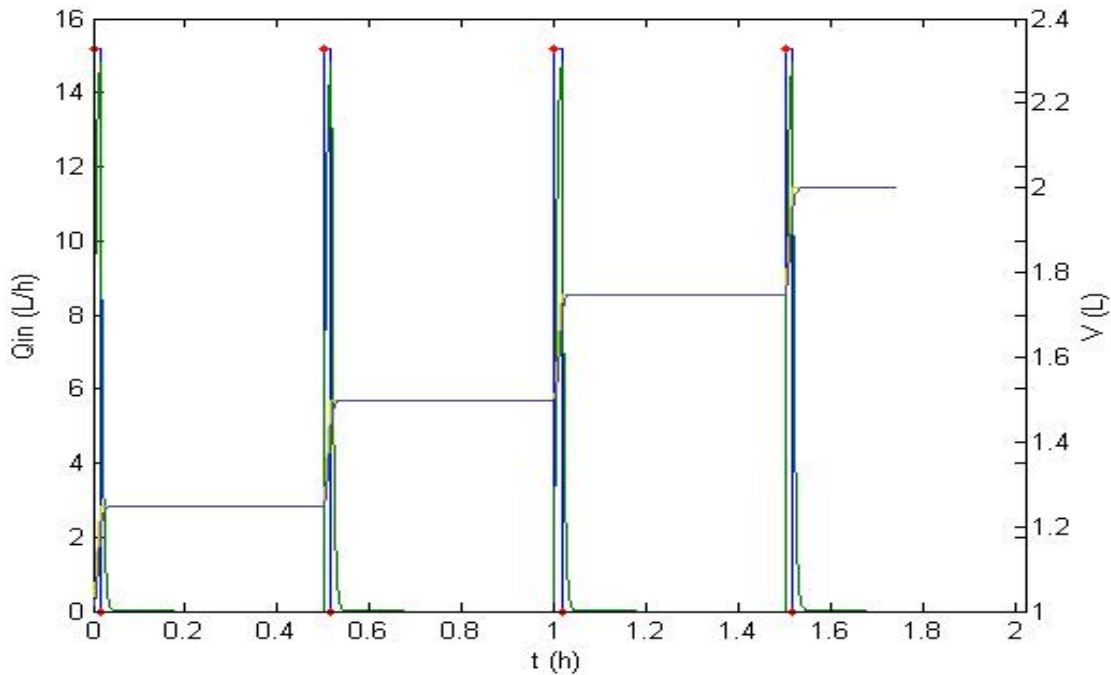
alimentación (verde, líneas verticales); la señal azul representa el DO medido de datos y la magenta es el DO filtrado.



**Figura 4.5:** Oxígeno disuelto e intervalos de alimentación en un pulse-batch a partir de datos experimentales. Nótese cómo las pendientes en los decrementos de DO son diferentes para cada ciclo.

De ella es posible observar que la dinámica del DO presentó mucha variabilidad, es decir, se ve cómo no se tiene una correlación entre ciclos. En teoría, lo que se debería apreciar en cada ciclo es algo similar a lo que sucede tras el tercer pulso de sustrato i.e., el DO decrece con cierta razón y una vez se consumió el sustrato, vuelve a aumentar debido a que los microorganismos no requieren tanta demanda de éste. Cabe destacar, sin embargo, que en los dos primeros ciclos el DO sí decrece, pero con dos tasas distintas. Este comportamiento se alude a algún fallo en el ajuste/calibración del equipo.

También se obtuvieron señales (Figura 4.6) del volumen (gris) y el flujo de entrada (azul), así como del instante cuando se dan los cambios (rojo, puntos). Se nota cómo el volumen aumenta con cada pulso de sustrato.



**Figura 4.6:** Volumen y flujo de entrada en un pulse-batch.

El siguiente paso consistió en estimar la tasa de respiración mediante el observador super-twisting (Figura 4.7). Es posible distinguir cómo los datos respirométricos (verde, puntos) poseen alta variabilidad; no obstante, el observador tiene la ventaja de que la estimación (azul) provee valores mucho más acertados. Dicha variabilidad muestra incluso dos valores fuera de rango en las 0.3 y 1.45 h aproximadamente. Con fines de comparación se hizo una reconstrucción de  $\rho$  (magenta) *a posteriori* usando filtros no causales<sup>2</sup>. La estimación de los datos respirométricos es precisa, aun así, estos en realidad tienen cinco minutos de retraso. También, el uso de un respirómetro puede perturbar el proceso e implica el uso de otros dispositivos. Los datos del DO medido fueron alimentados al observador sin filtrarse.

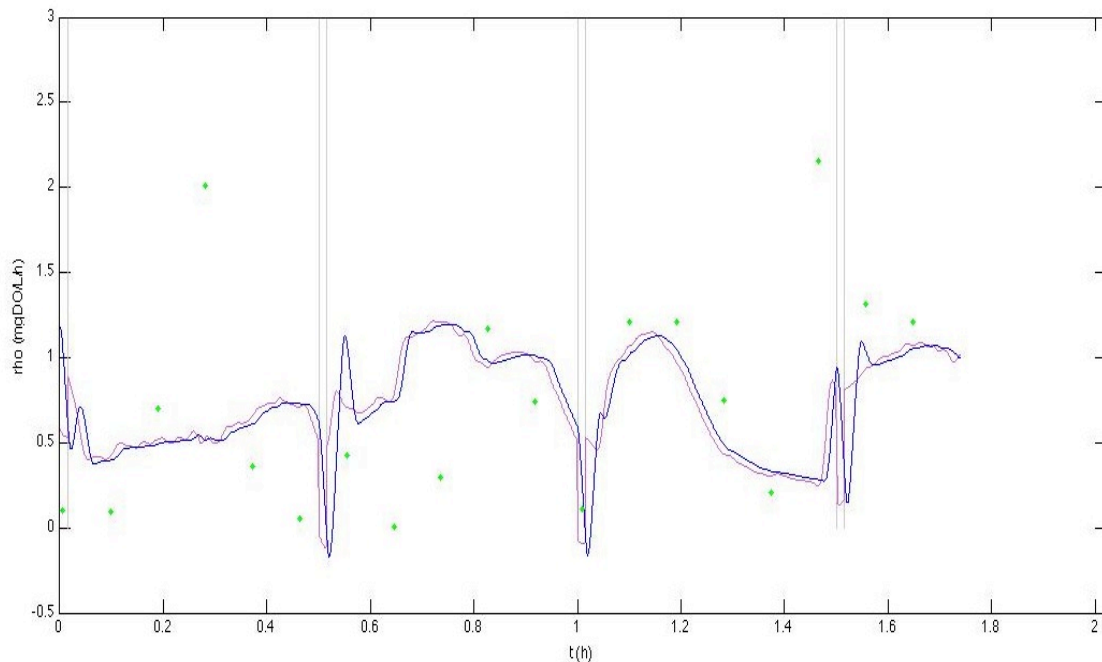
Aun cuando el observador se mostró robusto, sí introduce un poco más de ruido; inclusive se llegan a apreciar valores negativos alrededor de los flujos de entrada, dadas las oscilaciones. Se infiere de la figura que el sensor de DO en el respirómetro no estaba bien posicionado durante los primeros 50 minutos, por

<sup>2</sup>Para una explicación más detallada, ver la etapa 3 del presente capítulo.



lo que las mediciones respirométricas no son fiables (esto es claro a partir de los puntos de datos en los 40 min aproximadamente, lo cual es cero).

Se esperaba que en este régimen de alimentación (ya que la dinámica es de tipo Haldane), después de cada pulso, la tasa de respiración debería disminuir; luego debería aumentar hasta un máximo y finalmente disminuir de nuevo, a la vez que el sustrato era consumido. Las estimaciones del observador tuvieron este comportamiento esperado.



**Figura 4.7:** Estimación de la tasa de respiración con observador super-twisting.

En comparación con el uso de un diferenciador numérico, que requiere filtrado significativo, el observador super-twisting demuestra ser más rápido, ya que no requiere el filtrado de la señal medida si las ganancias son calibradas adecuadamente. La sintonización de las ganancias  $l_1$  y  $l_2$  del observador fue crucial. Para calcularlas se utilizó el método de desigualdades matriciales lineales (LMI) a partir de límites acotados de las dinámicas desconocidas y los errores de medición [Moreno, 2012b]. En pro de evitar inconvenientes numéricos, se reemplazó la función signo (*sign*) de  $\phi_2(e_1)$  en la ecuación 3.8 por una función tangente hiperbólica.

Para concluir con la sección, se obtuvieron resultados coherentes usando la señal de DO disponible (e inclusive ruidosa) como entrada al observador. El DO medido se alimentó al observador sin filtrarse. El observador a su vez, proporcionó rápida velocidad de respuesta y se corroboró su desempeño experimentalmente, mediante mediciones respirométricas. Entonces, en virtud de la buena operación del observador super-twisting y la cualidad invasiva de un respirómetro, posa como la alternativa que se planteaba al inicio de este texto, como una distinta posibilidad de determinación de variables/parámetros en bioprocesos. En las secciones subsecuentes, se expande esta hipótesis.

Los modelos son difíciles de calibrar principalmente debido a que existe mucha incertidumbre paramétrica en los sistemas biológicos. Otros esquemas de observación, como el *Filtro de Kalman Extendido* (EKF), requieren un modelo preciso para ser implementados. Por otro lado, el observador super-twisting no requiere del conocimiento del modelo, y por ello se decidió probarlo. En otras palabras, es robusto ante ciertas incertidumbres del modelo.

Es evidente que los datos respirométricos poseen alta incertidumbre. Como se recalca en párrafos anteriores, se alude a un mal funcionamiento del equipo (e.g. cortes de energía, hidráulica) que por falta de tiempo no pudo repetirse; para visualizar mejor esto, véase la Figura 4.5 en donde, para empezar, es complicado elegir una pendiente en los primeros dos ciclos. Aún así, el observador super-twisting parece estimar considerablemente bien la tasa de respiración, mostrándose robusto ante esta clase de perturbaciones. En la sección 4.3 se plantea una aplicación usando datos históricos de DO sin tanto ruido y con experimentos muy bien realizados.

## 4.2. Etapa 2

### Señal real de oxígeno disuelto

Para determinar el valor de la concentración de oxígeno disuelto (y consecuentemente la tasa de respiración) fue indispensable el uso de sensores. En el sistema experimental descrito en la sección anterior, se emplearon dos sensores; uno para el biorreactor y el otro para el respirómetro. Los sensores son sistemas físicos que

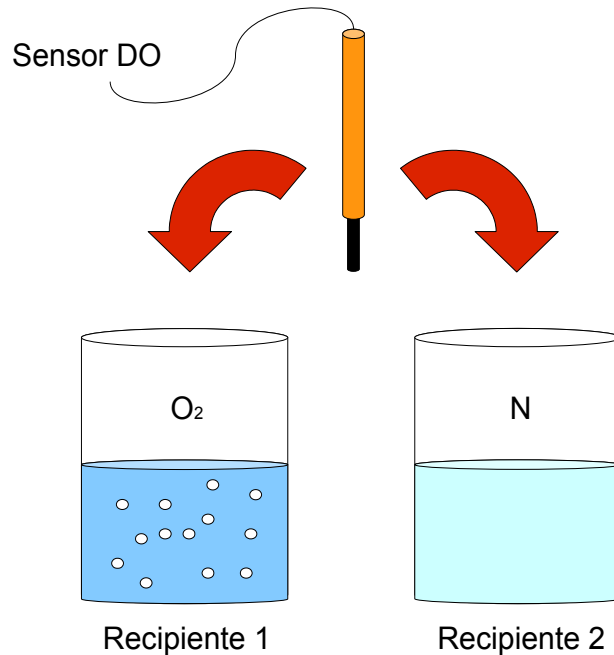
poseen una dinámica propia; es decir, el valor leído en realidad está desfasado del real por una constante de tiempo  $\tau$ . Los datos obtenidos experimentalmente no proveían el DO y  $\rho$  presentes en el momento del muestreo dentro del reactor, sino algunos minutos retrasados. Era, por lo tanto, deseable tratar de recuperar la señal original a partir de la señal medida. Un observador super-twisting permitió reconstruir aquella señal de DO que correspondía con el tiempo en que se realizó dicho muestreo.

La primera tarea de esta sección fue la caracterización de los sensores del biorreactor y el respirómetro, respectivamente; el método se explica a continuación. Posteriormente se procedió a probar el observador en lazo abierto. Se realizó el algoritmo y las simulaciones correspondientes para obtener una señal de DO válida.

#### 4.2.1. Caracterización de sensores de DO

La caracterización consistió en obtener mediciones de oxígeno disuelto provenientes de dos recipientes. Uno de ellos estaba lleno de agua burbujeada con aire y, por lo tanto, saturada de oxígeno; mientras que el otro se llenó con agua destilada y se añadió nitrógeno para desplazar al oxígeno. Una vez listos ambos recipientes, se tomaron las mediciones con el sensor en el recipiente 1 (agua con oxígeno) hasta que se estabilizara la medición del sensor ( $\approx 7$  mg/L). Posteriormente, se pasó el sensor al recipiente 2 (agua con nitrógeno) y se esperó hasta que nuevamente se estabilizara la lectura del sensor ( $\approx 2$  mg/L).

Visto de otra forma, lo que se hizo en este experimento fue cambiar repentinamente la concentración de oxígeno disuelto medida en el sensor con el fin de ajustar un modelo dinámico del mismo; es decir, se realizó una “entrada escalón” al sistema (Figura 4.8). .



**Figura 4.8:** Proceso para la caracterización de sensores.

Una vez se llevó a cabo lo anterior, el siguiente paso consistió en ajustar los datos obtenidos del sensor a un sistema de segundo orden, de manera que se calibraron los valores de  $\tau$  y  $\zeta$ , correspondientes a los parámetros de un sistema lineal de segundo orden

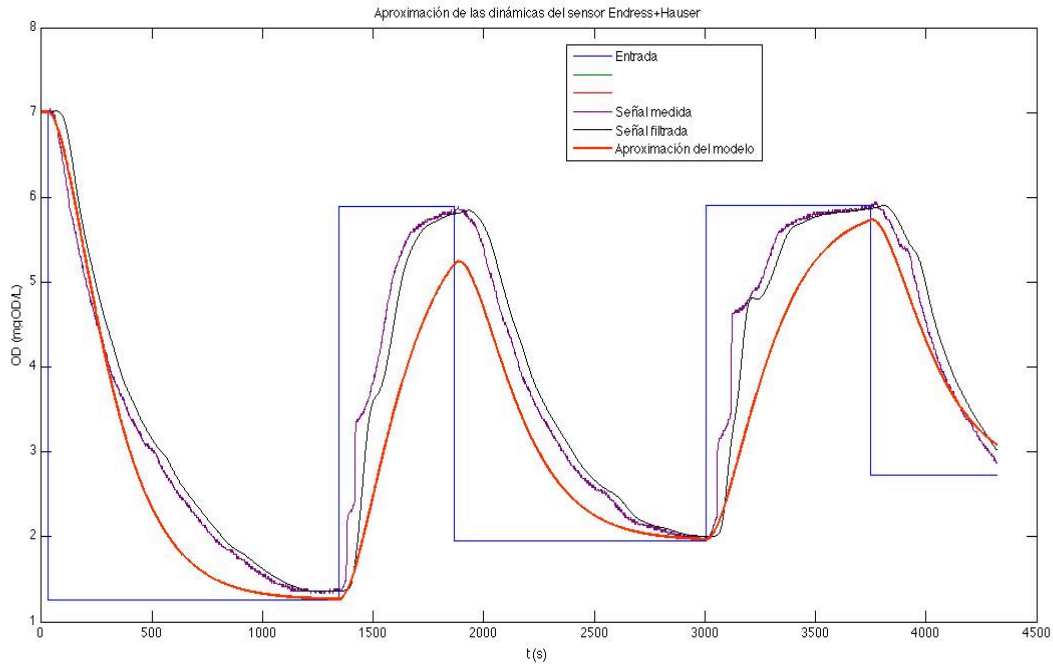
$$\tau^2 \frac{d^2 y}{dt^2} + 2\zeta\tau \frac{dy}{dt} + y = u.$$

donde  $u$  es la concentración de oxígeno disuelto en la punta del sensor,  $\tau$  es la constante de tiempo (o período natural del sistema),  $\zeta$  el coeficiente de amortiguamiento, y  $y$  es la medición de DO por el sensor.

#### 4.2.1.1. Sensor del biorreactor

En la Figura 4.9 se muestra la dinámica del sensor **Endress+Hauser COS4**, usado en procesos aerobios del LIPATA. Se aprecia que la velocidad de respuesta del sensor es un tanto lenta. Por otro lado, se puede notar cómo los descensos son

sustancialmente diferentes de los ascensos y pareciera que la constante de tiempo es distinta en ambos casos (ascensos y descensos).



**Figura 4.9:** Aproximación de la dinámica del sensor Endress+Hauser a un sistema de segundo orden.

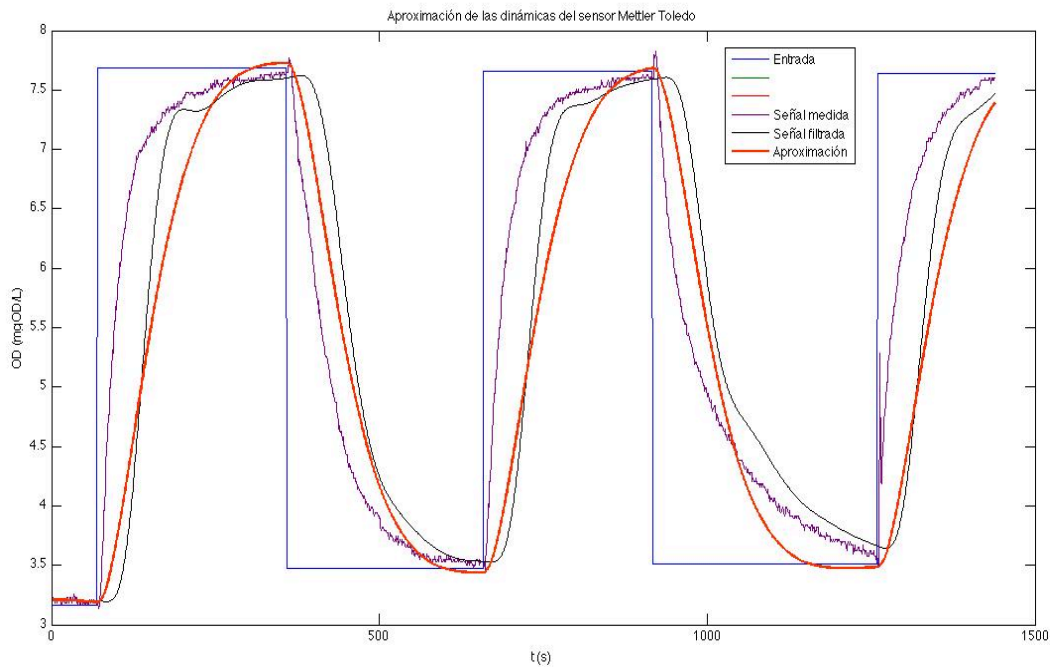
La figura muestra la entrada escalón (azul), la señal medida (violeta) y filtrada (negro) y la aproximación del modelo (rojo). Aquí se observa una relativamente buena aproximación en las pendientes negativas, pero en el caso de las positivas se tiene un ligero desfase; en otras palabras, la aproximación en los descensos es considerablemente mejor, sin embargo, se compromete un poco la aproximación a los ascensos. Cabe destacar que no se obtendrá un ajuste perfecto; lo que se desea es una aproximación que ajuste lo mejor posible a la entrada. La Tabla 4.1 resume los valores de las constantes del filtro, calibradas empíricamente.

**Tabla 4.1:** Constantes utilizadas en la calibración del modelo del sensor del biorreactor

Constante	Valor
$\tau$	152.84
$\zeta$	0.98

#### 4.2.1.2. Sensor del respirómetro

Por otro lado, la Figura 4.10 plasma el resultado de la caracterización del sensor **Mettler Toledo O2 4050e**, el cual fue empleado en el respirómetro debido a su flexibilidad de operación (calibración relativamente sencilla y duradera), tamaño reducido, capacidad de soportar ambientes hostiles, y su dinámica más rápida.



**Figura 4.10:** Aproximación de la dinámica del sensor Mettler Toledo a un sistema de segundo orden.

La velocidad de respuesta es notoria en contraste con el Endress+Hauser y sobretodo, las constantes de tiempo son similares en ascensos y descensos. La

modificación de la constante de tiempo para esta aproximación es tres veces menor que en el apartado anterior. Los valores obtenidos para el modelo de este sensor son presentados en la Tabla 4.2.

**Tabla 4.2:** Constantes utilizadas en la calibración del modelo del sensor del respirómetro

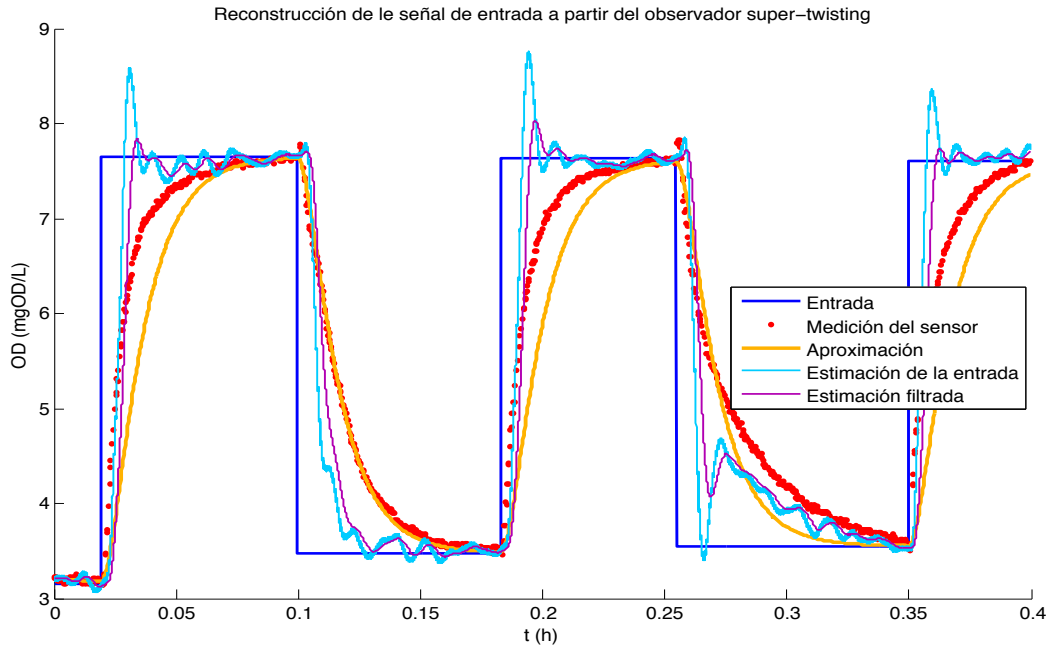
Constante	Valor
$\tau$	52.01
$\zeta$	0.83

### 4.2.2. Reconstrucción de la entrada

Aplicando los antecedentes enunciados y usando el modelo descrito con anterioridad, se procedió a reconstruir la señal de entrada<sup>3</sup> (DO verdadero en el reactor), aproximando a un sistema de segundo orden. La Figura 4.11 presenta las señales obtenidas en la caracterización del sensor de respirómetro Mettler Toledo (e.g. la medición del sensor, rojo punteado; la aproximación del modelo, anaranjado; y la entrada escalón, azul), así como la estimación de la entrada mediante un observador super-twisting de tercer orden (cyan), y su respectiva señal filtrada (violeta).

En la figura se aprecia cómo, tanto la estimación de la entrada como la estimación filtrada, anteceden a las mediciones (incluyendo ruido) y a la aproximación del modelo. Lo interesante aquí, es notar cómo efectivamente, la estimación del observador no sólo aproxima a la entrada escalón, sino que logra hacerlo considerablemente más rápido que las demás señales (sensor y modelo). En la Tabla 4.3 se presentan también los valores de calibración empleados.

<sup>3</sup>Se considera señal de entrada, al igual que el encabezado de la sección, por ser aquella que “es alimentada” al observador super-twisting de segundo orden que estima la tasa de respiración  $\rho(t)$ .



**Figura 4.11:** Reconstrucción del oxígeno disuelto con un super-twisting de tercer orden.

**Tabla 4.3:** Constantes utilizadas en la reconstrucción de la entrada

Constante	Valor
$\tau$	0.008
$\zeta$	1.11

Las fluctuaciones en la estimación del observador se vieron reducidas en la violeta (ligeramente desfasada); que es la misma señal, pero filtrada con un filtro tipo *Butterworth* de cuarto orden. Observando cómo se logró estimar de manera aceptable la entrada, es factible que este observador opere mucho mejor en un proceso con condiciones más realistas, en donde los cambios en el oxígeno disuelto dentro del reactor son menos drásticos.

El aliciente de reconstruir la entrada, que en este caso fue la concentración real de oxígeno disuelto en el seno del reactor, tiene fundamento en que resulta



mucho mejor contar con algo que se parezca (aproxime) a la tasa de respiración y no a datos medidos con un retraso inherente. En la sección anterior se usó la señal de DO proveniente de mediciones y se obtuvo, aún así, resultados relativamente buenos. Con el *reconstructor de la entrada* se espera que el desempeño del observador mejore considerablemente. Por lo tanto, en la siguiente sección se utilizan dos observadores super-twisting para estimar tanto el oxígeno disuelto en el reactor como la tasa de respiración.

Conviene mencionar que la señal del observador se adelanta a la señal proporcionada por el sensor (significativamente en los descensos) y se ajusta relativamente bien al escalón; esto es importante para mejorar la medición de la tasa de respiración. Aún así, existe un costo que hay que pagar: oscilaciones (ruido) y *delay* (retraso). Se nota sobre todo en los ascensos de la Figura 4.11 que el cambio en el escalón, hace que el observador oscile a valores aproximados de 8.5 mgDO/L, los cuales son muy altos e inconcebibles. Por otro lado, a pesar de una buena recuperación del escalón, existe también un retraso en la estimación ( $\approx 36$  s) que puede ser importante al estimar  $\rho$ .

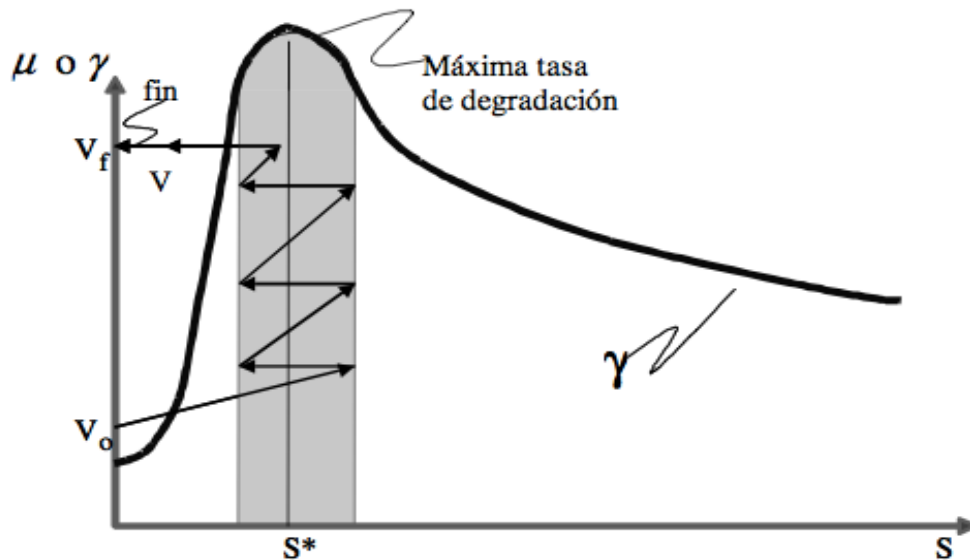
### 4.3. Etapa 3

#### Validación del esquema de estimación propuesto

En este capítulo se hace referencia a una estrategia de control previamente desarrollada por el equipo de investigación del LIPATA. La estrategia de control de tiempo óptimo dirigido por eventos (ED-TOC) ha sido exitosamente implementada para llevar a cabo la degradación de sustancias tóxicas en un proceso de degradación de 4-clorofenol [Moreno-Andrade & Buitrón, 2008]. Su diseño radica en hacer frente a aquellos problemas que se suscitan en el SBR bajo el modo de operación estándar y, optimizar la tasa de biodegradación.

El objetivo del control es, mediante la conmutación del flujo de entrada, mantener la concentración de sustrato oscilando en una zona en donde la tasa de degradación está en su máximo; en la Figura 4.12 se aprecia esto. Se inicia el llenado

con un volumen inicial  $V_o$  y se llena por medio de pulsos (pulse-batch) sin salirse de la zona gris. Cuando se llega al volumen final,  $V_f$ , el reactor actúa como un proceso en lotes (batch) y se deja terminar la reacción. Para información detallada de ED-TOC, se recomienda ver [Moreno et al., 2006] y [Betancur et al., 2004].



**Figura 4.12:** Estrategia ED-TOC.  $S^*$  representa la concentración de sustrato en donde se da la máxima tasa de degradación  $\gamma$ . Cabe destacar que  $\gamma$  y  $\mu$  son proporcionales por una constante.

Lo interesante es que ésta es una estrategia robusta; funciona con conocimiento parcial del modelo y ha sido probada exitosamente al degradar copiosas concentraciones tóxicas de 4-clorofenol (11200 mg4-CF/L). Ahora bien, ¿por qué incluir en la discusión una herramienta ya corroborada satisfactoriamente?

Sin demeritar la fidelidad de ED-TOC, una de las hipótesis planteadas al inicio de este trabajo de investigación, propone que el observador super-twisting es capaz de mejorar estrategias de control debido a su rápida convergencia. Entonces, es posible que para trabajos futuros, sea factible acoplar un esquema de estimación como el super-twisting con la estrategia de control ED-TOC, que en teoría debe de proveer resultados sobresalientes. Por ahora, sin embargo, yace la necesidad de probar que estimar la tasa de degradación/respiración con el observador propuesto, en vez del algoritmo empleado por ED-TOC, podría mejorar sustancialmente el desempeño.

El inconveniente con la estrategia de control, es que tal y como su nombre lo indica, está dirigida por eventos (Figura 4.13). Estos eventos dependen de qué tan bien se estime la *tasa másica de consumo de oxígeno* (OMUR<sup>4</sup>, por sus siglas en inglés). En ED-TOC, la OMUR se calcula usando la información del oxígeno disuelto y el conocimiento de algunos parámetros, pero también se usa la derivada del DO, calculada numéricamente.

Puesto que el actuador que recibe la señal de control es la bomba de llenado, si se da que la estimación es tardía, la bomba seguirá llenando hasta que llegue la señal, de manera que la concentración de sustrato sobrepasará la óptima ( $S > S^*$ ). Por otro lado, puede darse que no encienda la bomba a tiempo y haya más degradación de sustrato que la deseada ( $S \ll S^*$ ). El reto consistió, entonces, en obtener una señal similar a la de  $\gamma$  más rápida, incluso aún a costa de más ruido. De ser así, la detección del máximo se tendría antes, mejorando el control.

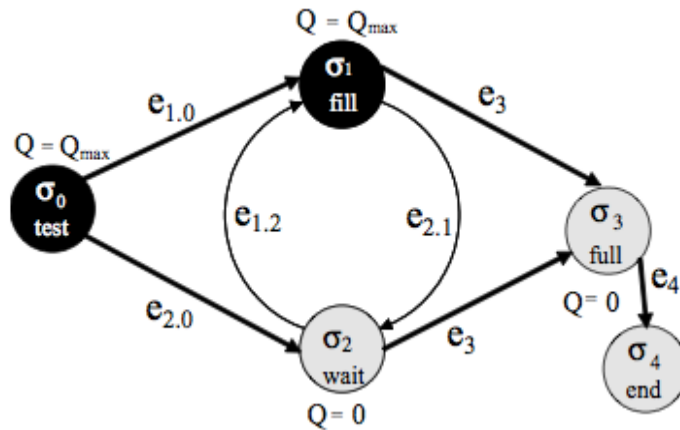
Para lograrlo se tienen en cuenta dos directrices:

- Utilizar un observador<sup>5</sup>  $ST$  en lugar de realizar el cálculo directo de  $\gamma$  mediante diferenciación numérica.
- Considerar la dinámica del sensor y tratar de estimar la señal de oxígeno disuelto en el reactor, usando esta señal en el observador  $ST$  para el cálculo de  $\gamma$  (Sección 4.3.2.2).

---

<sup>4</sup>Denotada como  $\gamma$  en este texto. Esta variable es proporcional a la tasa de respiración, misma que se desea medir con el observador.

<sup>5</sup>Éste puede aportar –con su estimación– aproximadamente 30 s de ventaja con la realidad, garantizando la posibilidad de actuar “a tiempo”.



**Figura 4.13:** Máquina de estados finitos de ED-TOC. Para mayor detalle referente a los estados, consultar [Betancur et al., 2004].

Es por ello que para verificar que el uso del algoritmo super-twisting (STA) resulta efectivamente mejor, se tiene que comparar con trabajos previamente validados. Para esto, es necesario entender por qué la  $\gamma$  calculada no es igual a la OMUR verdadera. En los apartados subsecuentes se expone brevemente el modelo y algoritmo básico y posteriormente el cálculo de variables de la estrategia de control, incluida la OMUR.

### 4.3.1. Estrategia de control de tiempo óptimo dirigido por eventos (ED-TOC)

#### 4.3.1.1. Modelo básico

El modelo considerado en el algoritmo de ED-TOC [Betancur, 2006] se define como:

$$\dot{X} = \mu(S)X - K_d X - X \frac{Q_{\text{in}}}{V}, \quad (4.23)$$

$$\dot{S} = -\frac{1}{Y_S} \mu(S)X + (S_{\text{in}} - S) \frac{Q_{\text{in}}}{V}, \quad (4.24)$$

$$\dot{O} = -\frac{1}{Y_O} \mu(S)X - bX + (O_{\text{in}} - O) \frac{Q_{\text{in}}}{V} + (O_{\text{sat}}(T) - O) k_L a(V), \quad (4.25)$$

$$\dot{V} = Q_{\text{in}}. \quad (4.26)$$

donde la tasa específica de crecimiento de biomasa  $\mu$  depende únicamente de la concentración de sustrato, de acuerdo con la ley de Haldane:

$$\mu(S) = \frac{\mu_{\text{max}} S}{K_S + S + S^2/K_I} = \frac{\mu^* S S^*}{S S^* + \beta(S^* - S)^2}. \quad (4.27)$$

Las suposiciones básicas son las siguientes:

1. A partir de la ley de Haldane,  $\mu$  tiene un único máximo en  $S = S^*$ , y  $\mu(S^*) = \mu^*$ ;
2. La biomasa total no cambia significativamente porque durante el (corto) ciclo de reacción, la cantidad total de biomasa producida es una pequeña fracción de la biomasa inicial. Entonces  $\dot{X} = -X \frac{Q_{\text{in}}}{V}$  y esto implica que si  $X_0 V_0$  es la biomasa total en el tiempo  $t = 0$ , con  $V(0) = V_0$  y  $X(0) = X_0$ , entonces:

$$X(t)V(t) = X_0 V_0 \quad \implies \quad X(t) = X_0 \left( \frac{V_0}{V(t)} \right)$$

3. Los coeficientes de rendimiento  $Y_S$  y  $Y_O$  son constantes;
4. La tasa de respiración endógena específica  $b$  también es constante;
5. El coeficiente de transferencia másica de oxígeno  $k_L a$  puede depender del volumen actual  $V$ , ya que menor volumen promueve una mejor transferencia de fase gas a fase líquida;

6. La temperatura  $T$  puede influir en la constante de saturación de oxígeno disuelto  $O_{\text{sat}}$ .

#### 4.3.1.2. Tasa másica de consumo de oxígeno (OMUR)

Como se mencionó con anterioridad, la estrategia conmuta la bomba de llenado entre encendido y apagado, a fin de mantener la concentración de sustrato alrededor del valor de  $S^*$ ; lo cual es equivalente a mantener  $\mu$  cerca de  $\mu^*$ . Empero, ninguna puede ser medida directamente; por lo tanto ED-TOC calcula la variable tasa másica de consumo de oxígeno (OMUR). Considerando la ecuación diferencial para el oxígeno disuelto (4.24), multiplicada por el volumen, se tiene:

$$\dot{O}V = - \underbrace{\left( \frac{1}{Y_O} \mu + b \right) XV}_{\text{OMUR}} + (O_{\text{in}} - O) Q_{\text{in}} + (O_{\text{sat}} - O) V k_L a.$$

Entonces, se puede definir la tasa másica de consumo de oxígeno como:

$$\text{OMUR} = (O_{\text{in}} - O) Q_{\text{in}} + (O_{\text{sat}} - O) V k_L a - \dot{O}V.$$

La variable  $\gamma$  usada en ED-TOC, corresponde a la OMUR *normalizada* con respecto al volumen final  $V_{\text{final}}$  (una constante de diseño conocida), con unidades de  $[ML^{-3}T^{-1}]$ , e.g.  $[\text{mg/L/h}]$ . Entonces, se tiene que  $\gamma = \text{OMUR}/V_{\text{final}}$ ; por lo tanto:

$$\gamma = (O_{\text{in}} - O) \left( \frac{Q_{\text{in}}}{V_{\text{final}}} \right) + (O_{\text{sat}} - O) \left( \frac{V}{V_{\text{final}}} \right) k_L a - \left( \frac{dO}{dt} \right) \left( \frac{V}{V_{\text{final}}} \right).$$

Pero, entonces, ¿qué es lo que mide  $\gamma$ ? Considerando que la concentración final de biomasa  $XV$  es constante e igual a  $X_0V_0$ , pero también a la final  $X_{\text{final}}V_{\text{final}}$ , entonces<sup>6</sup>

<sup>6</sup> $X_{\text{final}}$  es la concentración de biomasa esperada a volumen máximo del biorreactor.

$$\gamma = \left( \frac{1}{Y_O} \mu + b \right) XV \left( \frac{1}{V_{\text{final}}} \right) = \left( \frac{1}{Y_O} \mu + b \right) X_{\text{final}}. \quad (4.28)$$

Por lo tanto,  $\gamma(t)$  tiene relación lineal con  $\mu(t)$ , y así cuando  $\mu(t)$  alcance un máximo, también lo hará  $\gamma(t)$ . Esta es la razón por la que  $\gamma$  puede ser usada en ED-TOC:

$$\gamma(t) = k_1 \mu(t) + k_2, \quad k_1 = \frac{X_{\text{final}}}{Y_O}, \quad k_2 = X_{\text{final}} b. \quad (4.29)$$

#### 4.3.1.3. Cálculo de $\gamma$

Para calcular  $\gamma$  a partir de datos en línea, ED-TOC considera que:

1. La concentración de oxígeno disuelto  $O(t)$  usada, es una señal filtrada que resulta de las mediciones de un sensor de DO;
2. La señal derivada  $\dot{O}(t)$  se calcula numéricamente por diferenciación numérica de la señal discreta de  $O(t)$ , y es posteriormente filtrada para eliminar el posible ruido de amplificación:

$$dO_k = \frac{O_k - O_{k-1}}{\Delta t}, \quad \dot{O}_k = \left( dO_k - \dot{O}_{k-1} \right) \frac{\Delta t}{\tau_d}.$$

3. El valor de  $O_{\text{in}}$  usualmente se considera como cero:  $O_{\text{in}} = 0$ ;
4. La señal  $k_L a(t)$  se asume dependiente del volumen actual:

$$k_L a = k_L a_{\text{final}} \left( \frac{V_{\text{final}}}{V} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.30)$$

donde  $k_L a_{\text{final}}$  es una constante conocida ( $k_L a_{\text{final}} = 40 \text{ h}^{-1}$ );

5. La  $O_{\text{sat}}(t)$  se considera linealmente dependiente de la temperatura:

$$O_{\text{sat}} = O_{\text{sat}@20\text{C}} \left( \frac{20 - T}{5.449} \right). \quad (4.31)$$

donde  $O_{\text{sat}@20\text{C}}$  es una constante conocida (e.g.  $O_{\text{sat}@20\text{C}} = 7.3$  mgDO/L) y es la constante de saturación de oxígeno disuelto a  $T = 20^\circ\text{C}$ . El valor de la pendiente 5.449 se encontró experimentalmente;

6. Finalmente, la señal discreta  $\gamma$  resultante (4.27), también se filtra para eliminar algo de ruido adicional.

En ED-TOC, la OMUR considera lo siguiente:

- La derivada  $\frac{dO}{dt}$  es estimada numéricamente i.e., para cada muestra  $k$  se toma  $O(k) - O(k - 1)$  y se divide entre el tiempo de muestreo  $T_s$ . Con ello se va construyendo la señal  $dO(k)$ . Ésta luego debe ser filtrada (filtro de primer orden). Es decir, la  $\dot{O}(t)$  usada va retrasada con respecto a la verdadera.
- La señal de oxígeno disuelto usada  $O(t)$  se refiere a la medición arrojada por el sensor con un filtrado simple. Entonces,  $O(t)$  no corresponde al oxígeno disuelto en el reactor, sino una señal retrasada en el tiempo de esta señal.
- Se usan los valores actuales de  $O_{\text{sat}}$  (calculado con la temperatura) y de  $k_L a$  (calculado con el volumen).
- Además, la  $\gamma$  calculada se filtra nuevamente para quitar algo de ruido. Esta señal se denominará  $\hat{\gamma}(t)$ .

Al final se observa que  $\hat{\gamma}(t)$  no es igual a la verdadera  $\gamma(t)$ . Debido al retraso inherente de la medición, se tiene que  $\hat{\gamma}(t) \approx \gamma(t - t_d)$ , donde  $t_d$  es un retraso (delay).

#### 4.3.1.4. Algoritmo básico

ED-TOC considera dos regímenes de operación que van de acuerdo a la conmutación de la bomba, mencionado anteriormente:



**Bomba ON.** La bomba de llenado está encendida. Por tanto,  $Q_{\text{in}} > 0$  tal que  $(S_{\text{in}} - S)Q_{\text{in}}/V > (1/Y_S)\mu X$ , es decir,  $\dot{S} > 0$ .

Esto implica que  $S(t)$  aumentará en el reactor. Se asume que este régimen empieza con  $S = S_{\text{ini}}^{\text{on}} < S^*$  y termina con  $S_{\text{fin}}^{\text{on}} > S^*$ , de manera que  $S(t)$  eventualmente alcanzará  $S^*$  y lo pasará hasta  $S = S_{\text{fin}}^{\text{on}}$ . En términos de  $\mu$  se ve como un incremento de  $\mu_{\text{ini}}^{\text{on}} = \mu(S_{\text{ini}}^{\text{on}})$  hasta un máximo  $\mu^*$  en  $S^*$ , y luego un decremento hasta  $\mu_{\text{fin}}^{\text{on}} = \mu(S_{\text{fin}}^{\text{on}})$ . Ya que  $\gamma$  es proporcional a  $\mu$ , se verá el mismo comportamiento en  $\gamma(t)$ : de  $\gamma_{\text{ini}}^{\text{on}}$  hasta  $\gamma_{\text{fin}}^{\text{on}}$ , pasando por  $\gamma^*$ .

**Bomba OFF.** La bomba de llenado está apagada. Por tanto,  $Q_{\text{in}} = 0$  y así  $\dot{S} < 0$ .

Esto implica que  $S(t)$  disminuirá en el reactor. De manera similar, se asume que este régimen empieza con  $S = S_{\text{ini}}^{\text{off}} > S^*$  y termina con  $S_{\text{fin}}^{\text{off}} < S^*$ . Se tiene que  $S(t)$  disminuirá eventualmente hasta  $S^*$  y alcanzará  $S = S_{\text{fin}}^{\text{off}}$ . Se verá el mismo comportamiento en  $\mu(t)$  y  $\gamma(t)$  (como en el régimen anterior); ambos alcanzarán un máximo y luego disminuirán: desde  $\gamma_{\text{ini}}^{\text{off}}$  hasta  $\gamma_{\text{fin}}^{\text{off}}$ , pasando por  $\gamma^*$ .

La conmutación entre regímenes se realiza en el algoritmo mediante la definición de un umbral  $0 < q < 1$  tal que una conmutación ocurre cuando  $\gamma < q\gamma_{\text{max}}$ . El valor de  $q$  es un parámetro de diseño, por ejemplo,  $q = 0.90$ . El valor de  $\gamma_{\text{max}}$  se calcula en línea, como se menciona posteriormente.

Algunas consideraciones usadas por ED-TOC son las siguientes:

1. Cuando se pasa de **OFF** a **ON**, se tiene  $\gamma_{\text{ini}}^{\text{on}} = \gamma_{\text{fin}}^{\text{off}} = q\gamma_{\text{max}}$  y cuando se pasa de **ON** a **OFF** se tiene  $\gamma_{\text{ini}}^{\text{off}} = \gamma_{\text{fin}}^{\text{on}} = q\gamma_{\text{max}}$ ;
2.  $\gamma_{\text{max}}$  es el valor máximo alcanzado por  $\gamma(t)$  durante cada régimen de operación. Al principio de cada régimen, se inicializa a  $\gamma_{\text{max}} = \gamma_{\text{ini}}^{\text{on}}$  ó  $\gamma_{\text{max}} = \gamma_{\text{ini}}^{\text{off}}$ ; luego se actualiza con cada iteración, comparando el valor actual de  $\gamma$  con el valor de  $\gamma_{\text{max}}$ ; si  $\gamma > \gamma_{\text{max}}$  entonces  $\gamma_{\text{max}} = \gamma$ ; de lo contrario, permanece sin cambios.
3. En el régimen **ON**, la bomba no se activa completamente hasta  $Q_{\text{max}}$ ; en su lugar, empieza con un valor bajo que incrementa (exponencialmente) el flujo de entrada hasta alcanzar  $Q_{\text{max}}$ ; esto se hace por dos razones:

- el salto inducido en el valor calculado de  $\gamma$  debido al término  $-OQ_{in}$  será pequeño y,
- esto hace que  $\gamma(t)$  incremente paulatinamente, ya que  $S(t)$  cambiará lentamente; esto último se realiza para considerar la dinámica de los filtros involucrados en el cálculo de  $\gamma$ .

El último truco es necesario porque el cálculo de  $\gamma$  usa señales filtradas; ni la derivada de DO, ni la señal usada de DO son realmente los valores de estas variables dentro del reactor. Existe un retraso inherente –e inevitable– en la medición, de manera que se necesita completa certeza que  $\gamma$  ha alcanzado un máximo y ha empezado a disminuir. Esto implica que aún con  $q = 1$ , el sustrato oscilará alrededor de  $S^*$ . Para ver esto, supóngase que el valor verdadero de  $\gamma$  es la señal  $\Gamma(t)$ ; tal que  $S = S^*$  cuando  $\Gamma = \Gamma^*$ ; y que  $\gamma(t)$  (medida) está retrasada  $t_d$  unidades de tiempo de  $\Gamma(t)$ :

$$\gamma(t) = \Gamma(t - t_d). \quad (4.32)$$

Cabe notar que  $\Gamma(t)$  es la que es proporcional a  $\mu(S)$ , no  $\gamma(t)$ . Entonces se puede escribir  $\Gamma(S)$  y, por tanto existen  $\Gamma^* = \Gamma(S^*)$ ,  $S_{low} < S^*$  y  $S_{high} > S^*$  tal que  $\Gamma(S_{low}) = \Gamma(S_{high}) = q\Gamma^*$ .

Ahora, considérense tres instantes de tiempo (suponiendo estar en el régimen **ON**) y asumiendo la determinación perfecta del máximo ( $\gamma_{max} = \Gamma^*$ ), la conmutación de regímenes ocurre cuando  $\gamma < q\Gamma^*$ :

1. El tiempo  $t_{ini}$ , que es aquel cuando se conmutan regímenes (en el caso estudiado, de **OFF** a **ON**); entonces

$$\gamma(t_{ini}) = q\Gamma^* = \gamma_{ini}^{on} = \Gamma(t_{ini} - t_d).$$

Esto implica que al tiempo  $t_{ini} - t_d$ , el valor de  $\Gamma$  es  $q\Gamma^*$ . Por consiguiente,  $S(t_{ini} - t_d) = S_{low}$ . Dado que en  $t - t_d$  se estaba en el régimen **OFF** y continuó así hasta ahora, en  $t = t_{ini}$ , el valor actual de  $S(t_{ini})$  debe ser menor

que ese en  $t = t_{\text{ini}} - t_d$ , i.e. si se define  $S_{\text{ini}} = S(t_{\text{ini}})$ , entonces  $S_{\text{ini}} < S_{\text{low}}$  y  $\Gamma(t_{\text{ini}}) < q\Gamma^*$ . Si el retraso es grande, se corre el riesgo de tener  $S_{\text{ini}} \ll S^*$ .

2. El tiempo  $t_*$ , que es cuando  $\Gamma(t)$  ha alcanzado un máximo, i.e.

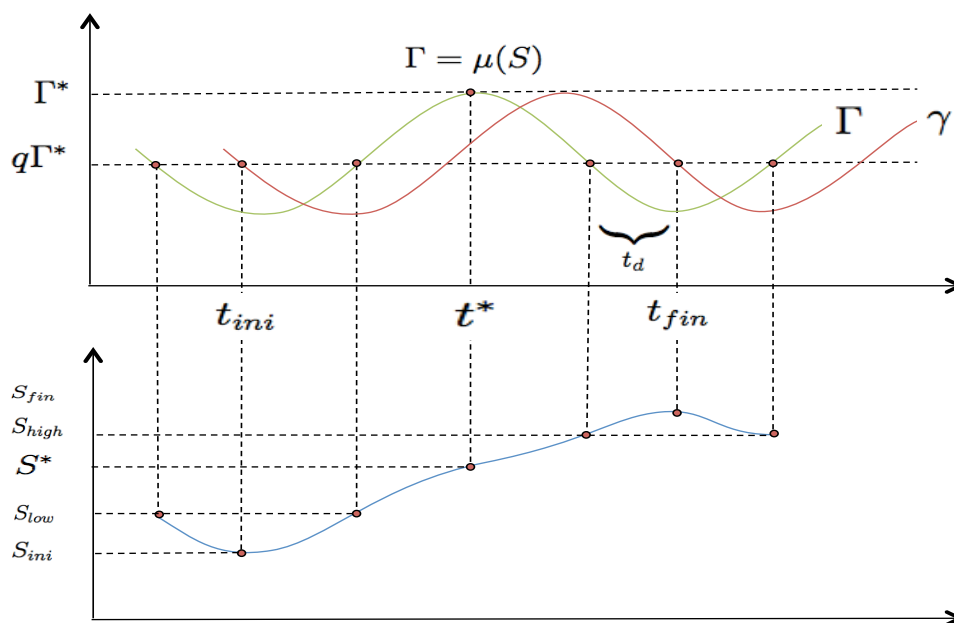
$$\Gamma(t_*) = \Gamma^* = \gamma(t_* + t_d).$$

Nótese que  $t_* - t_{\text{ini}}$  es el tiempo necesario para que  $S(t)$  vaya de  $S_{\text{low}}$  (el valor en  $t_{\text{ini}}$ ) hasta  $S^*$  (el valor en  $t = t_*$ ), pasando por  $S_{\text{ini}}$ . Nótese también que no se alcanzará un máximo en  $\gamma(t)$  hasta  $t = t_* + t_d$ . El valor de  $\Gamma(t_* + t_d)$  será menor que  $\Gamma^*$  y acarrea que  $S(t_* + t_d) > S^*$ .

3. El tiempo  $t_{\text{fin}}$ , que es cuando se decide conmutar de regímenes (en el caso estudiado, de **ON** a **OFF**); entonces

$$\gamma(t_{\text{fin}}) = q\Gamma^* = \gamma_{\text{fin}}^{\text{on}} = \Gamma(t_{\text{fin}} - t_d).$$

En este momento, el valor de  $S_{\text{fin}} = S(t_{\text{fin}})$  es mayor que  $S_{\text{high}}$ , ya que este valor ha sido alcanzado  $t_d$  unidades de tiempo antes, cuando  $\Gamma(t_{\text{fin}} - t_d) = q\Gamma^*$ . Desde que la bomba está encendida,  $S(t)$  ha ido incrementando durante este tiempo. Si  $Q_{\text{in}}$  es muy alto, se arriesga tener  $S_{\text{fin}} \gg S^*$ , aun si  $q$  está muy cerca de 1. Por supuesto, también  $\Gamma(t_{\text{fin}}) < q\Gamma^*$ . La Figura 4.14 ofrece una idea más clara de los parámetros mencionados anteriormente.



**Figura 4.14:** Representación gráfica de la notación del algoritmo ED-TOC. Cuando  $\gamma$  alcanza su máximo, ésta se encuentra  $t_d$  unidades de tiempo desfasada de  $\Gamma$ . El tiempo  $t^*$  en donde  $\Gamma$  es proporcional a la tasa  $\mu(S)$ , corresponde a la concentración óptima de sustrato  $S^*$ . De 0 a  $t_{ini} = \text{OFF}$ , de  $t_{ini}$  a  $t_{fin} = \text{ON}$ , y desde  $t_{fin}$  = OFF.

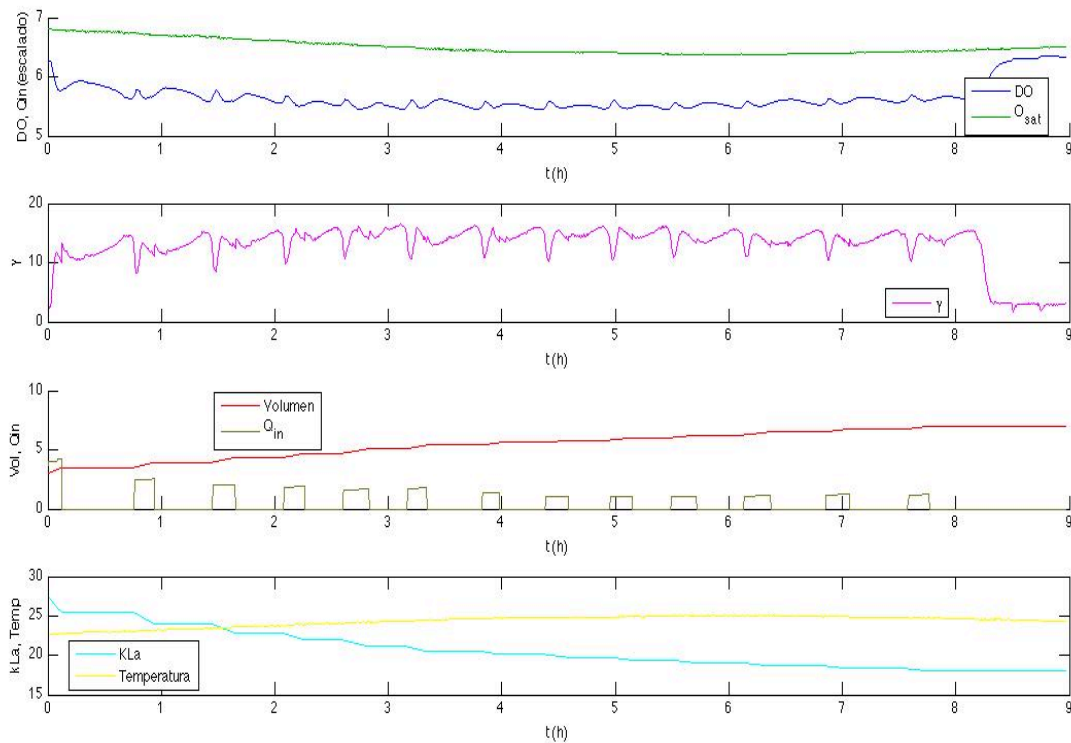
Se puede realizar un análisis similar para la otra situación, en el régimen **OFF**. En cualquier caso, la implicación del retraso en la medición de  $\gamma$  es que, sin importar cuán cercano se ajuste  $q$  a 1, se tendrán oscilaciones alrededor de  $S = S^*$ , y estas pueden ser grandes. A propósito, es imposible hacer que  $q = 1$ , ya que el cálculo del máximo  $\gamma_{\max}$  se hace en retrospectiva: no se sabe que se alcanzó un máximo hasta después, cuando el valor actual ya es menor; por tanto,  $q$  debe ser menor que 1, y esto provee un margen de seguridad para la conmutación.

Del análisis anterior queda claro que es altamente deseable reducir el retraso  $t_d$ , y se pretende hacerlo usando un observador super-twisting, en lugar de un algoritmo numérico para estimar  $\Gamma(t)$ .

## 4.3.2. Aplicación del algoritmo

### 4.3.2.1. Recuperación y reconstrucción de datos

El primer paso consistió en la recuperación de los datos originales de ED-TOC, obtenidos en 2009 de otro proyecto de investigación del grupo. Se obtuvieron datos del oxígeno disuelto y oxígeno de saturación, OMUR, volumen y flujo de entrada, coeficiente de transferencia másica de oxígeno y temperatura (Figura 4.15). Para tener un amplio rango de comparación, se escogieron datos que variaran en su modo de operación; en otras palabras se recolectaron archivos con distintos pulsos de alimentación; en este caso se observan más de 12 pulsos.



**Figura 4.15:** Datos recuperados de archivo histórico ED-TOC.

Téngase en cuenta que cada uno de estas señales se considera como “medido”. Se observa el efecto de dilución en el descenso de DO y el aumento de OMUR cuando el flujo de entrada cambia a un estado positivo.

#### 4.3.2.2. Oxígeno disuelto dentro del reactor

Posteriormente, se recuperó la señal de oxígeno disuelto en el seno del reactor, a partir de las mediciones. Tal y como se explicó en el capítulo anterior, se ajustó a un modelo de segundo orden que representara el reactor y el sensor utilizado en el experimento, y que generó los datos de DO. El objetivo fue verificar si un observador super-twisting podía recuperar la señal original. El modelo se define como:

$$\tau^2 \ddot{y}(t) + 2\xi\tau_d \dot{y}(t) + y(t) = u(t). \quad (4.33)$$

Para facilidad de modelado se considera el parámetro  $\xi = 1$ , por lo que el modelo equivale a una concatenación de dos sistemas de primer orden:

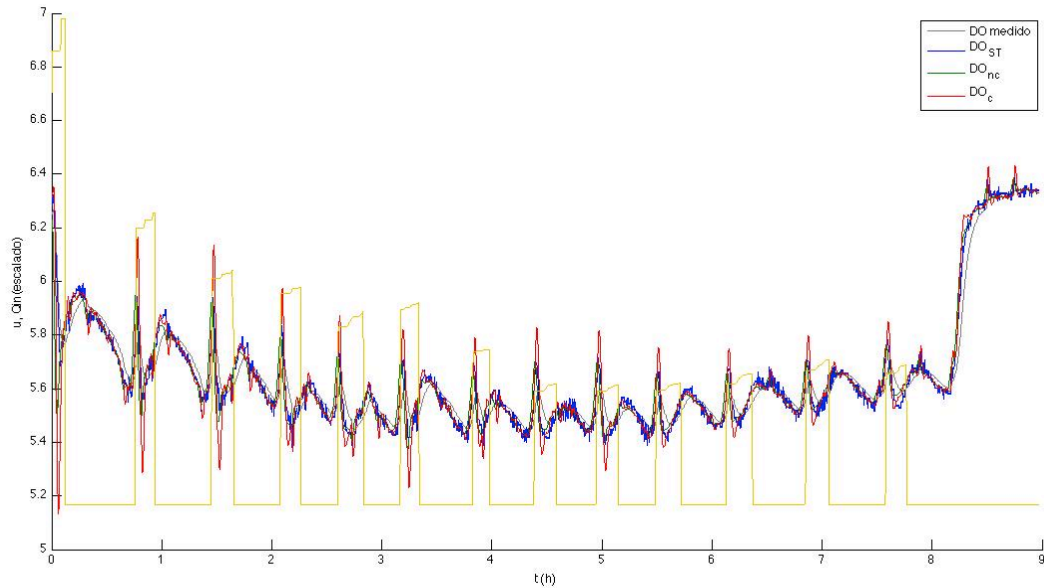
$$\tau_d \dot{w}(t) + w(t) = u(t), \quad (4.34)$$

$$\tau_d \dot{y}(t) + y(t) = w(t). \quad (4.35)$$

El procedimiento consistió en estimar las primeras y segundas derivadas de la señal de DO (recuperada de los datos de ED-TOC) mediante filtros causales y no causales. Los filtros **causales** son aquellos que sí pueden ser implementados en línea porque usan datos que se conocen, del presente y pasado. En contraste, los filtros **no causales** usan también datos del futuro, pero pueden eliminar ruido sin desfaseamiento (sin retraso); por lo que no son implementables en tiempo real. El propósito de los filtros fue obviamente suavizar la señal manipulada. Para este caso resultaron de interés los filtros causales puesto que el objetivo de este trabajo es la estimación en línea; sin embargo, se utilizaron los filtros no causales como método de comparación en vista que la señal recuperada no estaba retrasada en el tiempo.

En el siguiente paso se ajustaron los parámetros super-twisting generalizados y se implementó un primer observador para estimar la entrada del segundo filtro de primer orden (ecuación 4.34); seguido de esto, se utilizó un segundo observador para estimar la entrada del primer filtro de primer orden (ecuación 4.33). Al final se reconstruyó la señal mediante la simulación del sistema lineal. La Figura 4.16 exhibe las estimaciones del oxígeno disuelto en el seno del reactor. En este

caso y para facilidad de análisis, el flujo  $Q_{in}$  se encuentra escalado de manera que sea posible ver la dilución.

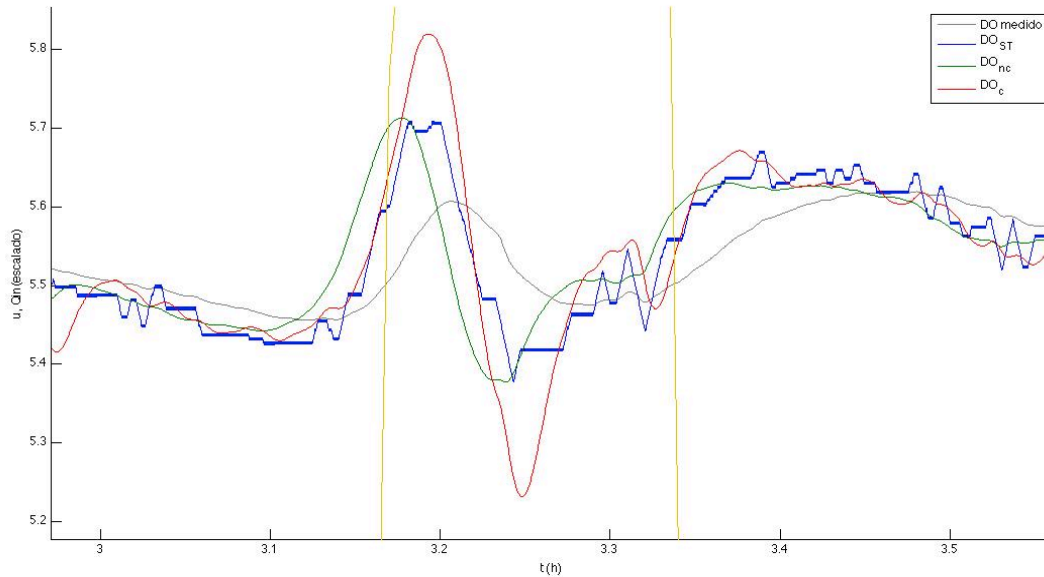


**Figura 4.16:** Estimaciones del DO mediante un sistema de dos observadores super-twisting y filtros digitales.

Se generaron tres señales importantes y el objetivo fue lograr que la señal  $DO_{ST}$  (el DO estimado por los observadores, azul), se pareciera lo más posible a la señal  $DO_{nc}$  (el DO que resultó de reconstruir con filtros no causales y que podría considerarse como la “verdadera”, verde), mejorando la estimación con la señal  $DO_c$  (el DO reconstruido con filtros causales, rojo) y por supuesto más rápida que la señal original (DO medido, gris), especialmente en las transiciones cuando  $Q_{in}(t)$  cambió de cero a algún valor positivo o viceversa.

La Figura 4.17 representa un intervalo de tiempo de la figura anterior, con fines de mejor apreciación. En este caso, la señal  $DO_{nc}$  es la estimación usando filtros no causales y representa la verdadera concentración de oxígeno disuelto en el reactor. Es apreciable como  $DO_c$ , la estimación usando filtros causales, se encuentra inevitablemente retrasada, y aún así es más rápida que la señal original (gris). La señal  $DO_{ST}$  (azul) es aquella estimada por los observadores super-twisting. Es evidente el ruido que introduce esta última, ya que es el precio a pagar por la velocidad de convergencia con el observador; empero, también es notable que

anticipa a ambas  $DO_c$  y la señal original, especialmente en los descensos. Cabe destacar que el ajuste anterior se llevó a cabo con la sintonización adecuada de parámetros.



**Figura 4.17:** Estimaciones del DO mediante dos observadores. Acercamiento.

Los parámetros del observador fueron calibrados de manera que se disminuyera el ruido y se obtuviera una señal tolerable para ser usada por ED-TOC. En términos de “tolerable” se hace referencia a que a pesar de la inevitable amplificación del ruido y las oscilaciones, siguiera siendo útil para que la estrategia de control pudiera determinar los máximos y realizar la conmutación entre regímenes de operación. La Tabla 4.4 provee los parámetros utilizados para esta estimación.

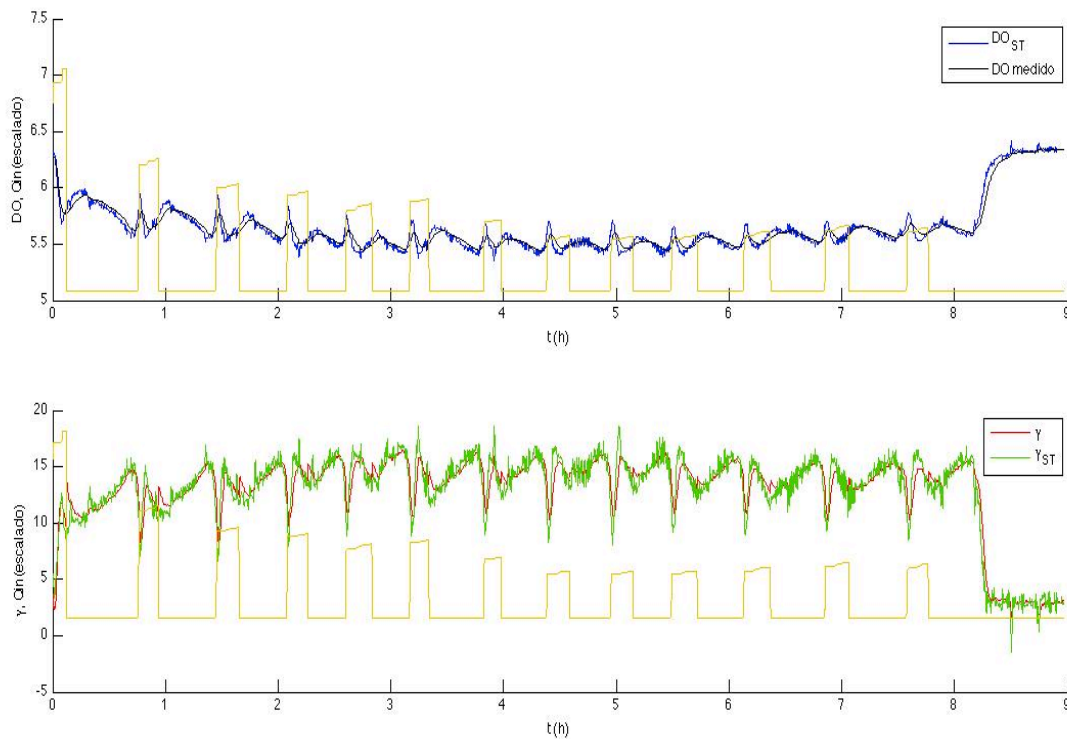


**Tabla 4.4:** Parámetros del observador super-twisting para estimar el DO

Parámetro	Observador $ST$
$\eta$	10
$p$	1/2
$q$	1.5
$\mu$	1
$L_1$	12.5
$L_2$	20

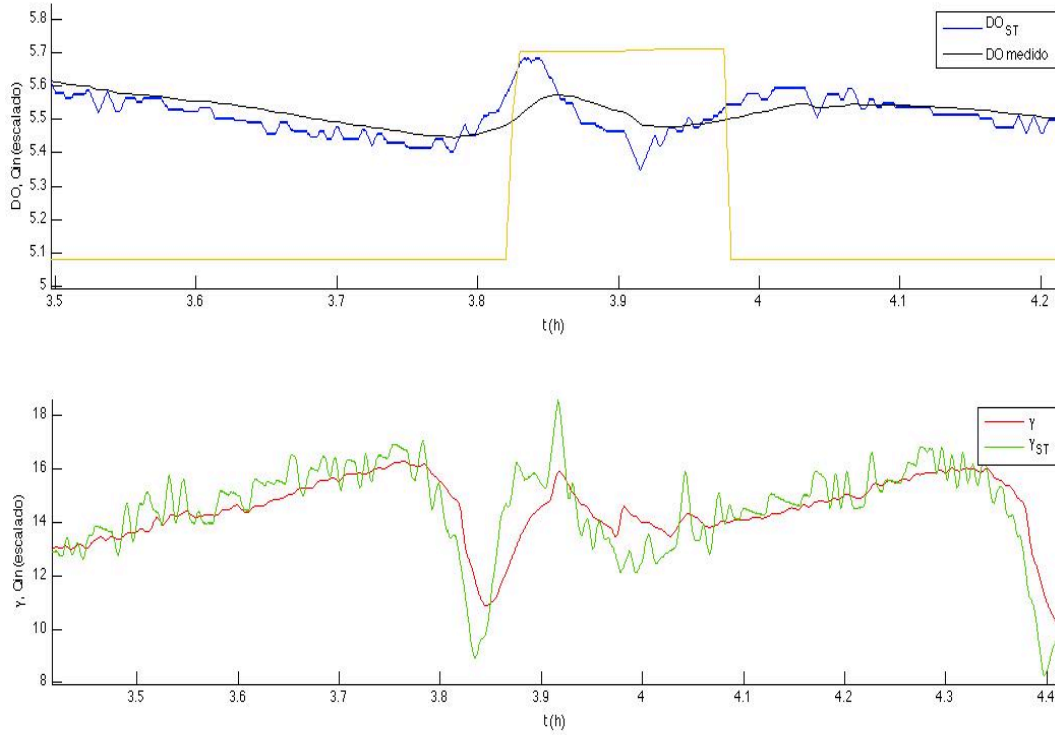
#### 4.3.2.3. Estimación de OMUR

Las señales de DO obtenidas en los párrafos anteriores fueron alimentadas a otro observador super-twisting para estimar  $\gamma$ . El incentivo fue hacer que la conmutación entre regímenes de operación en la señal estimada  $\hat{\gamma}$  se llevara a cabo con mayor rapidez que la  $\gamma$  convencional por ED-TOC. La Figura 4.18 plasma la recuperación anterior del oxígeno disuelto superpuesta con la estimación de OMUR. De igual manera se tuvo que calibrar el conjunto de parámetros.



**Figura 4.18:** Recuperación del DO y  $\gamma$ .

Es evidente una buena aproximación de la estimación; La señal  $\gamma_{ST}$  (verde, abajo) es capaz de anticipar a la señal original  $\gamma$  (rojo, abajo) considerablemente. Una mejor apreciación se puede ver en la Figura 4.19. De nuevo, la desventaja del observador son las oscilaciones que se tienen; en algunos casos inclusive muy altas (tal y como se puede apreciar al final de la reacción), de manera que se llegan a dar valores negativos, inverosímiles por supuesto.



**Figura 4.19:** Estimaciones del DO y  $\gamma$ . Acercamiento.

Para la aplicación final se considera a  $\gamma_{ST}$  como la señal a usar. La Tabla 4.5 resume los valores de los parámetros usados para el observador super-twisting, con base en la entrada  $DO_{ST}$ .

**Tabla 4.5:** Valores de parámetros OMUR con la entrada  $DO_{ST}$

Parámetro	$u_{ST}$
$\eta$	20
$p$	1/2
$q$	1
$\mu$	0.75
$l_1$	20
$l_2$	40

#### 4.3.2.4. Adecuación a ED-TOC

El último paso consistió en probar si los resultados obtenidos en los apartados precedentes eran aplicables a la estrategia de control. Para hacerlo, se diseñó un simulador que representara el algoritmo de ED-TOC. Se sabe que en esta estrategia se opera mediante regímenes; por tanto, se tiene que  $Q_{in} = 0$  (**OFF**) ó  $Q_{in} > 0$  (**ON**). Como primera tarea, se tuvieron que recuperar aquellos instantes que determinan el cambio de régimen. Para los cambios de OFF a ON, simplemente se puede notar cuando  $Q_{in}$  pasa de ser cero a un valor positivo. Para los cambios de ON a OFF hay que tener en cuenta la dinámica del actuador i.e., la bomba de llenado tarda en apagarse tal que  $Q_{in} = 0$  después de enviada la señal. Recuperar dicho instante fue posible mediante la detección del momento en que la bomba dejó de tener flujo constante.

En la Figura 4.20 se ilustra el flujo de entrada con las respectivas transiciones entre regímenes. Los puntos azules denotan los instantes donde ocurren las transiciones de ON a OFF; los puntos rojos, las transiciones de OFF a ON; y los puntos cyan, aquellos instantes poco antes de que la bomba quede completamente apagada.

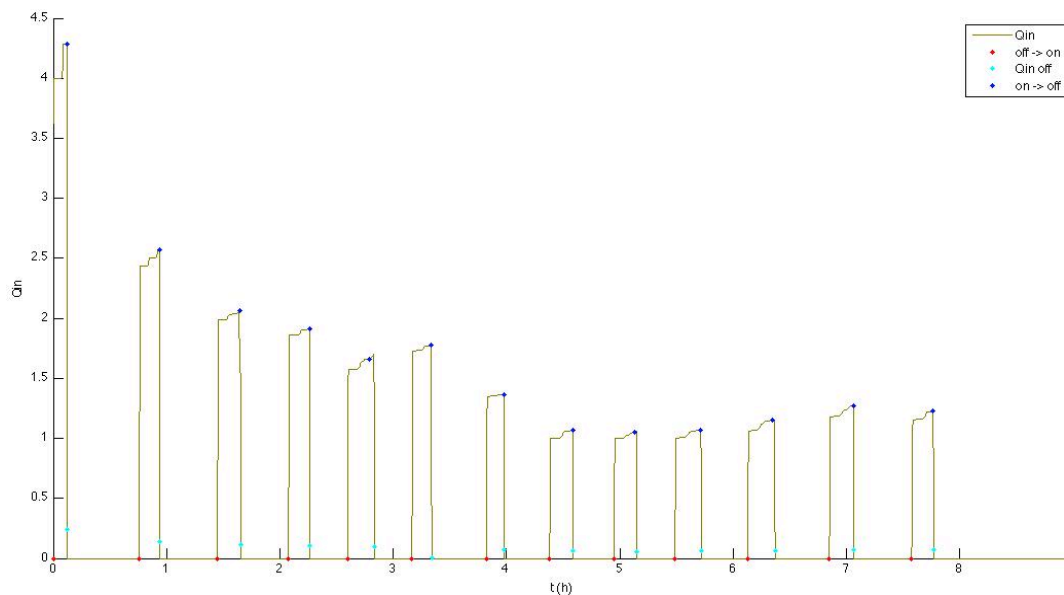


Figura 4.20: Cambios de régimen simulados.

La tarea subsecuente estribó en aplicar el algoritmo ED-TOC a los subconjuntos de datos correspondientes a un régimen. En otras palabras, con base en los regímenes que exista, se tomaron esos datos simulando pequeños transitorios. Se usó la OMUR estimada ( $\gamma_{ST}$ ) para determinar el cambio de régimen antes de los históricos de ED-TOC. De nuevo, fue menester una adecuada sintonización de parámetros del modelo para obtener buenos resultados.

El algoritmo considera tres fases de operación con valores  $\{-1, 0, +1\}$ , las cuales se relacionan con los máximos y mínimos locales:

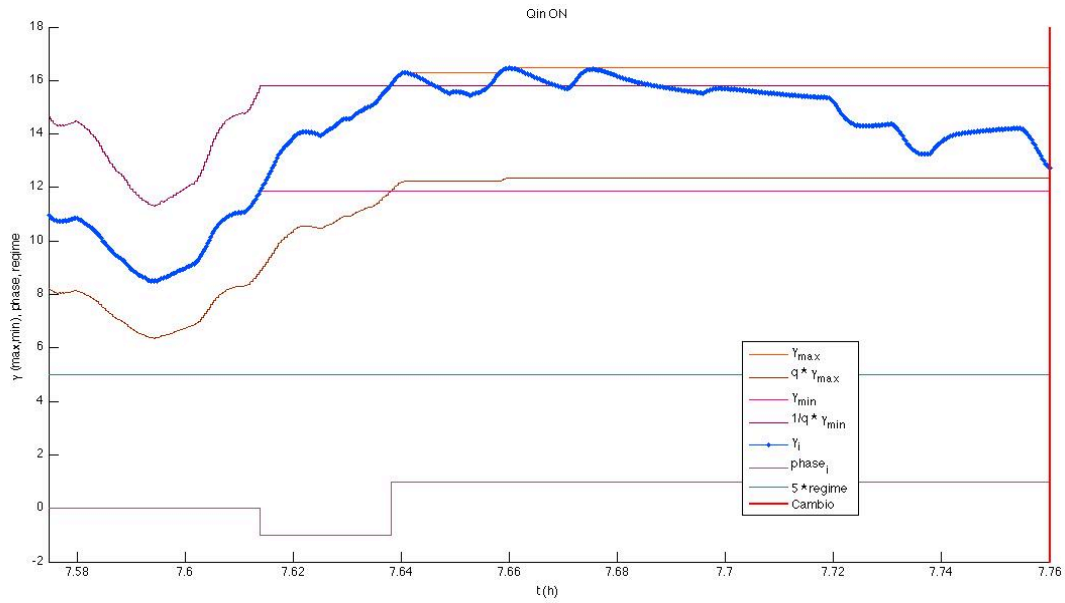
- En la **fase 0** se espera hasta obtener un valor confiable de la señal  $Q_{in}$ , ya que la conmutación de régimen genera un salto de cero a algo positivo. En el cambio se tiene un incremento en  $\gamma$ , más no un máximo que podría provocar cambios de régimen indeseados.
- En la **fase -1** se espera el mínimo. El cambio (a la fase +1) se realiza cuando  $\gamma(t)$  sobrepasa un valor poco mayor que el mínimo ( $\gamma_k > (\frac{1}{q})\gamma_k^{min}$ ). Esto indica que ya se pasó por el mínimo dado por el valor de  $\frac{1}{q}$  (violeta, Figura 5.12).
- En la **fase +1** se espera el máximo. La fase termina y cambia al régimen recíproco (ON  $\rightarrow$  OFF / OFF  $\rightarrow$  ON ) al disminuir  $\gamma(t)$  un valor por debajo del máximo ( $\gamma_k < q\gamma_k^{max}$ ). De nuevo,  $q$  indica que se pasó por el máximo (café, Figura 5.12).

En la figuras siguientes se muestra la corrida para los cambios de régimen para un lote de 13 pulsos de alimentación. La señal  $\gamma_i$  (azul) equivale a la porción de  $\hat{\gamma}$  analizada;  $\gamma_{max}$  (anaranjado) y  $\gamma_{min}$  (magenta) son el máximo y mínimo local de  $\hat{\gamma}$ , respectivamente;  $q\gamma_{max}$  (café) y  $\frac{1}{q}\gamma_{min}$  (violeta), son las señales umbral de cada régimen<sup>7</sup>; *phase* (gris), la fase actual; *regime* (gris azulado), el régimen actual  $\{0,1\}$  (ON/OFF) multiplicado por cinco; y *cambio* (rojo), que la una línea vertical que indica el cambio de régimen<sup>8</sup>. La Figura 4.21 representa un subconjunto de datos en donde no se detectó cambio; la 4.22 uno en donde se detectó el cambio pero

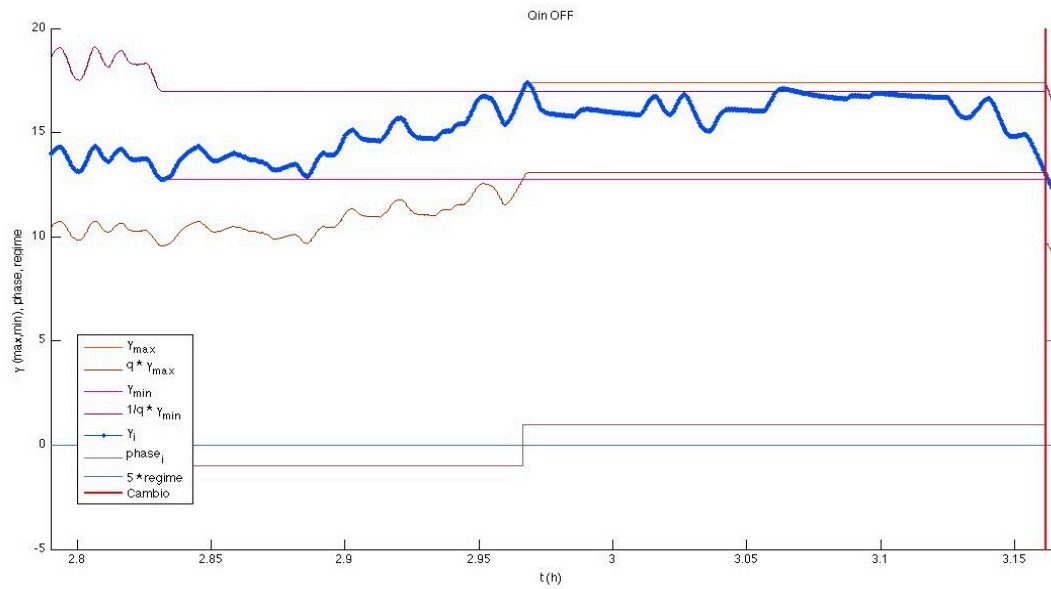
<sup>7</sup>El valor del parámetro de diseño “ $q$ ” sirve para decidir cuándo terminar el régimen actual.

<sup>8</sup>Conforme la línea roja se ubique más hacia la izquierda, mejor será el cambio (más rápido).

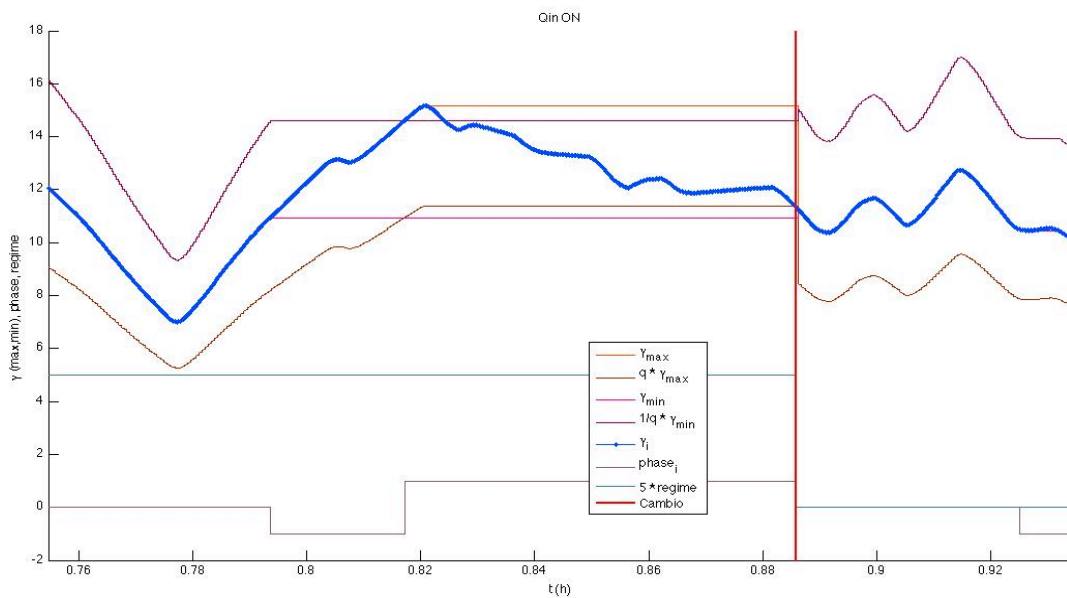
con muy poca diferencia que ED-TOC ( $\approx 0.6$  min); y la 4.23 uno que detectó el cambio con considerable antelación que el algoritmo original ( $\approx 2.9$  min). De esta manera se aprecia que los valores del umbral se encuentran dentro de los límites locales.



**Figura 4.21:** Simulación de subconjuntos de datos de ED-TOC. Sin cambio de régimen.



**Figura 4.22:** Simulación de subconjuntos de datos de ED-TOC. Cambio tardío de régimen.



**Figura 4.23:** Simulación de subconjuntos de datos de ED-TOC. Cambio adecuado de régimen.

Otra situación indeseable podría suceder cuando el algoritmo probado

usando el observador  $ST$ , determinó cambiar de régimen cuando aun no se había alcanzado el máximo, por considerar como el máximo (falsamente) a un pico de ruido antes de tiempo.

Lo interesante aquí es obtener un solo cambio de régimen por cada subconjunto de datos; esto se puede apreciar por la línea vertical roja (*cambio*). Si *cambio* estuviese en el extremo derecho de la figura, la transición no se habría logrado. En este caso se requirió la adecuación del parámetro  $q$  para tener resultados coherentes; no obstante, se debe tener cuidado con el valor de éste. Bien es sabido que existe un compromiso con las ganancias del observador i.e., reducen la diferencia entre la OMUR estimada con la verdadera y, sin embargo, amplifican el ruido. Visto de otro modo, el retraso disminuye y es posible detectar oportunamente el máximo pero se obtienen oscilaciones más grandes.

La tolerancia de las oscilaciones se logró conseguir con la también reducción de  $q$ . Entonces, el reto estuvo en encontrar valores que permitieran evitar cambios de régimen en falso; aun así, se debe tener en consideración que cuando disminuye el valor de  $q$ , se retrasa la detección del máximo una vez alcanzado. Como se observa en la Figura 4.23, *cambio* sucedió antes de que la prueba terminase; esto indica que la  $\hat{\gamma}(t)$  usada en el modelo fue capaz de enviar una señal que anticipó el encendido/apagado de la bomba de llenado, antes que ED-TOC; de esta manera se pudo avalar el cumplimiento del objetivo. En este caso particular, el valor del parámetro  $q$  con el que se obtuvo el mejor desempeño fue 0.75.

El proceso de sintonización fue muy similar al de secciones anteriores. En caso de no modificar  $q$ , sucedía que no se detectaba el cambio de régimen o inclusive se detectaba más de uno (cambios en falso). Mediante un reporte de los cambios (Tabla 4.6) y un análisis estadístico (Tabla 4.7) del archivo ejecutado, fue posible obtener instantes de tiempo  $\Delta(t)$  en los que la OMUR estimada fue más rápida que la medida. Esto último se puede distinguir en el valor de la media para  $\Delta(t)$  de casi un minuto de ventaja para el observador super-twisting. Por otro lado, conviene recalcar que a pesar de tener un porcentaje cercano a 70 en los cambios de régimen logrados, aún se requiere de especial ajuste en los cambios de apagado a encendido.

Existe un compromiso de dependencia con el parámetro  $q$ . Entonces, si  $q$



es mucho menor que 1, la tendencia es que el algoritmo original ED-TOC anticipe la señal del observador (acción fuera de tiempo); y si el valor de  $q$  tiende a 1, se hacen cambios antes de que sea aceptable (acción antes de tiempo). En vista de ello, lo ideal es encontrar y sintonizar un valor entre 0.7 y 0.95, que es el umbral en donde se encontraron los mejores resultados.

Finalmente, y generalizando, se puede considerar exitosa la aplicación del observador super-twisting a ED-TOC, si se cuenta con varios segundos de antelación. En este peculiar caso se obtuvo un minuto de anticipación, con lo que sí se podría aseverar exitosa. Este minuto de diferencia parece poco, pero podría ser significativo para evitar, ya sea un sobrellenado hacia valores de sustrato muy por encima de  $S^*$ , o un tiempo de consumo de sustrato demasiado largo que lleve a valores de  $S$  mucho menores que  $S^*$ . Es decir, se lograría mantener a  $S(t)$  mucho más cercana a  $S^*$ , mejorando así el desempeño del controlador.

Se realizaron también simulaciones con archivos que contienen menos pulsos, y en vista de que los cambios son menores, es mucho más sencillo de sintonizar y además se llegó a obtener alrededor de un 90% de cambios exitosos.

**Tabla 4.6:** Historial de los cambios de régimen para un archivo ED-TOC dado

<b>Acción</b>	<b>a/b</b>	<b>%</b>
Total de éxito	17/25	68
Acción antes de tiempo	0/25	0
Acción fuera de tiempo	8/25	32
Éxito ON→OFF	10/13	76.9
Éxito OFF→ON	7/12	58.3

**Tabla 4.7:** Estudio estadístico de los cambios de régimen para un archivo ED-TOC dado

Estadística	Mínimo	Media	Máximo
$\Delta(t)$		58 s	
$\Delta(t)$ OFF	19 s	90.5 s	176 s
$\Delta(t)$ ON	1 s	11.6 s	28 s

# Capítulo 5

## Conclusiones y perspectivas

La demanda del instrumental necesario para caracterizar aguas y/o determinar parámetros hace que el uso de observadores en la Ingeniería Ambiental se amplíe continuamente. Bien sea para estimar concentraciones de biomasa y sustrato, o en este caso particular, la tasa de respiración; es de esperar que se llegue a aceptar como estándar de determinación de parámetros. Este enfoque puede ser visto como una alternativa a la utilización de equipo de instrumentación caro y complejo.

Otro aspecto importante a destacar en este trabajo de investigación es que en la fase experimental se tuvo inconvenientes con el sensor del respirómetro. Posibles fallas debido al ensuciamiento del mismo se ven reflejadas en valores falsos en la medición de la Figura 4.7, en donde el sensor no hace frente a perturbaciones como, por ejemplo, un flóculo adherido a la punta. El observador super-twisting, en contraste, es robusto a perturbaciones como esta, siendo capaz de mejorar los datos respirométricos significativamente, tal y como se manifestó en la figura y su discusión.

Desde un punto de vista técnico se alude a un ahorro energético, sin embargo, no es posible saber una cantidad aproximada (e.g. kw/h). Aun así, es un hecho que usando sistemas de estimación (mediante algoritmos) en lugar de sistemas de medición (mediante sensores físicos) conlleva a un ahorro evidente.

Por otro lado, al plantearse interrogantes sobre mejoras en la eficiencia, se considera que en porcentajes de remoción no exista una diferencia significativa; en todo caso, sí es válido aseverar que en tiempo la haya. Tal y como se observó en la

discusión del último apartado del capítulo anterior, la velocidad de convergencia del observador fue capaz de conceder un tiempo de aproximadamente 13 min de ganancia, para una reacción de tipo pulse-batch de 3.15 h.

Con base en los objetivos e hipótesis planteadas, fue factible obtener resultados experimentales de las tasas de respiración. Estas vinieron de un proceso aerobio de degradación de 4-clorofenol como compuesto tóxico en agua residual sintética. Aunque los valores de las tasas son inferiores a lo reportado en la literatura (2.5–25 mgDO/L/h, aproximadamente), se atribuye principalmente a inconvenientes físicos con el montaje del proceso y ajustes en el sistema de control. No obstante, se pudo recuperar información valiosa que pudiera ser alimentada al observador. Por último, el observador se mostró capaz de estimar la tasa de respiración. A partir de esto, puede ser posible aplicarlo a otros procesos aerobios para generalizarlo.

Posteriormente, el modelo matemático propuesto para el sistema de sensor-biorreactor utilizado experimentalmente, ajustó eficientemente el experimento por pulsos (pulse-batch), pero no para los demás tipos de experimentos (e.g. batch y fed-batch). Quizás se deba principalmente a la dilución o a una calibración deficiente del sensor. Aun así, se observa cierta similitud entre el modelo y los datos experimentales, pero no suficiente para pensar en usar un modelo matemático completo en el diseño de controladores u observadores.

Por último, la caracterización de sensores dio lugar a la reconstrucción de la verdadera señal de oxígeno disuelto dentro del reactor, resultando exitosa mediante el estimador de la entrada, un observador super-twisting de tercer orden, con estimaciones que se adelantan a las mediciones del sensor. Sin embargo, el costo de esto es un incremento en las oscilaciones de la señal. De esta manera, podría ser posible mejorar la calidad de las mediciones a pesar de las limitaciones de sistemas físicos como sensores y/o transductores. No obstante, la sintonización de ganancias y parámetros del estimador resulta muy importante en términos de adecuar la señal.

El desempeño del observador fue validado en la estrategia de control ED-TOC. La estrategia, exitosa ante altas concentraciones de 4-CF, pudo haber sido mejorada y, por lo tanto, el proceso optimizado mediante los observadores super-

twisting. Aunque en todo caso esto sería una presunción, ya que actualmente no se cuenta con un sistema experimental donde probarlo y la conclusión se basa en un análisis con datos históricos. Se pudo mostrar que la aplicación de los observadores propuestos llevaría a una conmutación anticipada de los dos regímenes de operación en el reactor, pero tan solo se puede especular que esto redundaría en un mejor desempeño del proceso. Para comprobarlo, habría que validarlo experimentalmente.

Como propuesta de un trabajo futuro, se podría plantear la validación experimental, con algoritmos de control similares a ED-TOC pero haciendo uso de los observadores super-twisting propuestos y corroborar si el apagar o encender la bomba con mayor celeridad, como se indica en el algoritmo, conlleva a resultados superiores en la realidad. Es probable que hubiese resultado mejor usar un solo observador super-twisting de tercer orden, en lugar de dos en cascada; podría probarse esta hipótesis.

Una posible aplicación podría darse en los procesos de maximización en línea de la tasa de producción de bio-hidrógeno que están actualmente siendo estudiados por el grupo de investigación, o bien en el control de celdas de combustible microbianas, donde también es importante estimar tasas de producción.

# Referencias

- [AFNOR, 1985] AFNOR (1985). *Evaluation en milieu aqueux de la biodégradabilité aérobie “ultime” des produits organiques solubles. Norme Française NF T 90-312, Paris.* Association Française de Normalisation.
- [Alcaraz & González, 2007] Alcaraz, V. & González, V. (2007). *Robust nonlinear observers for bioprocesses: Application to wastewater treatment*, volume 361, (pp. 119–164). © Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [Alford, 2006] Alford, J. S. (2006). Bioprocess control: Advances and challenges. *Computers and Chemical Engineering*, 30, 1464–1475.
- [APHA, 2005] APHA (2005). *Standard Methods for the Examination of Water and Waster.* APHA, AWWA, and WEF.
- [Battista et al., 2012] Battista, H. D., Picó, J., & Garelli, F. (2012). Reaction rate reconstruction from biomass concentration measurement in bioreactors using modified second-order sliding mode algorithms. *Bioprocess Biosyst Eng.*
- [Betancur, 2006] Betancur, M. J. (2006). *Control Óptimo y Robusto para una Clase de (Bio)Reactores mediante Detección de Eventos.* PhD thesis, Universidad Nacional Autónoma de México, [http : //132.248.9.9 : 8080/tesdig/Procesados2005/0602373/Index.html](http://132.248.9.9:8080/tesdig/Procesados2005/0602373/Index.html).
- [Betancur et al., 2004] Betancur, M. J., Moreno, J. A., Moreno-Andrade, I., & Buitrón, G. (2004). Control y mejoras en biorreactores para tratar aguas residuales tóxicas. In *Congreso Anual de la AMCA.*

- [Boulkroune et al., 2009] Boulkroune, B., Darouach, M., Zasadzinski, M., Gillé, S., & Fiorelli, D. (2009). A nonlinear observer design for an activated sludge wastewater treatment process. *Journal of Process Control*, 19, 1558–1565.
- [Buitrón & Moreno, 2004] Buitrón, G. & Moreno, J. (2004). Modeling of the acclimation/deacclimation process of a mixed culture degrading 4-chlorophenol. *Water Science and Technology*, 49(1), 79–86.
- [Buitrón et al., 2003] Buitrón, G., Schoeb, M., & Moreno, J. (2003). Automated sequencing batch bioreactor under extreme peaks of 4-chlorophenol. *Water Science and Technology*, 47(10), 175–181.
- [Castelló et al., 2002] Castelló, E., Ghislieri, D., Ono, A., & Borzacconi, L. (2002). Optimización del funcionamiento de un SBR para la remoción de materia orgánica y nutrientes. In *XXVIII Congreso Interamericano de Ingeniería Sanitaria y Ambiental*.
- [Chéruy, 1996] Chéruy, A. (1996). Software sensors in bioprocess engineering. *Journal of Biotechnology*, 52, 193–199.
- [Dabros et al., 2010] Dabros, M., Schuler, M. M., & Marison, I. W. (2010). Simple control of specific growth rate in biotechnological fed-batch processes based on enhanced online measurements of biomass. *Bioprocess Biosyst Eng*, 33, 109–1118.
- [Dávila et al., 2010] Dávila, A., Moreno, J. A., & Fridman, L. (2010). Variable gains super-twisting algorithm: A Lyapunov based design. In *American Control Conference 2010*.
- [Dochain, 2003] Dochain, D. (2003). State and parameter estimation in chemical and biochemical processes: a tutorial. *Journal of Process Control*, 13, 801–818.
- [Dochain & Vanrolleghem, 2001] Dochain, D. & Vanrolleghem, P. (2001). Dynamical modelling and estimation in wastewater treatment processes. *IWA Publ.*

- [Jiménez, 2001] Jiménez, B. (2001). *La contaminación ambiental en México: causas, efectores y tecnología apropiada*. Limusa, Colegio de Ingenieros Ambientales de México A.C., Instituto de Ingeniería de la UNAM y FEMISCA.
- [Lafont et al., 2011] Lafont, F., Busvelle, E., & Gauthier, J. (2011). An adaptive high-gain observer for wastewater treatment systems. *Journal of Process Control*, 21, 893–900.
- [Marsili-Libelli & Vaggi, 1997] Marsili-Libelli, S. & Vaggi, A. (1997). Estimation of respirometric activities in bioprocesses. *Journal of Biotechnology*, 52, 181–192.
- [Mendoza, 2011] Mendoza, I. (2011). Estimación de tasas de reacción en bioprocesos mediante observadores tipo super-twisting. Master's thesis, Universidad Nacional Autónoma de México.
- [Metcalf & Eddy, 2003] Metcalf & Eddy (2003). *Wastewater Engineering, Treatment and Reuse*. G. Tchobanoglous & F. L. Burton & H. D. Stensel.
- [Ming-zhi Huang et al., 2010] Ming-zhi Huang, Jin-quan Wan, Yong-wen Ma, Wei-jiang Li, Xiao-fei Sun, & Yan Wan (2010). A fast predicting neural fuzzy model for on-line estimation of nutrient dynamics in an anoxic/oxic process. *Bioresource Technology*, 101, 1642–1651.
- [Moreno, 2012a] Moreno, J. A. (2012a). Lyapunov function for levant's second order differentiator. In *51st IEEE Conference on Decision and Control*. (pp. 6448–6453). Hawaii.
- [Moreno, 2012b] Moreno, J. A. (2012b). *Sliding Modes after the First Decade of the 21st Century*, volume 412, chapter 4: Lyapunov Approach for Analysis and Design of Second Order Sliding Mode Algorithms, (pp. 113–149). Springer Berlin Heidelberg.
- [Moreno et al., 2006] Moreno, J. A., Betancur, M. J., Buitrón, G., & Moreno-Andrade, I. (2006). Event-Driven Time-Optimal Control for a Class of Discontinuous Bioreactors. *Biotechnology and Bioengineering*, 94(4).



- [Moreno-Andrade, 2006] Moreno-Andrade, I. (2006). *Biodegradación óptima de compuestos fenólicos en un reactor discontinuo secuencial*. PhD thesis, Universidad Nacional Autónoma de México.
- [Moreno-Andrade & Buitrón, 2004] Moreno-Andrade, I. & Buitrón, G. (2004). Variation of the microbial activity during the acclimation phase of a SBR system degrading 4-chlorophenol. *Water Science and Technology*, 50(10), 251–258.
- [Moreno-Andrade & Buitrón, 2008] Moreno-Andrade, I. & Buitrón, G. (2008). Performance of an optimally filled discontinuous bioreactor degrading 4-chlorophenol. *Water Science and Technology*, 57(12).
- [Pat et al., 2011] Pat, A., Vargas, A., & Buitrón, G. (2011). Practical automatic control of a sequencing batch reactor for toxic wastewater treatment. *Water Science and Technology*, 63(4).
- [Polit et al., 2001] Polit, M., Genovesi, A., & Claudet, B. (2001). Fuzzy logic observers for a biological wastewater treatment process. *Applied Numerical Mathematics*, 39, 173–180.
- [Schügerl, 2001] Schügerl, K. (2001). Progress in monitoring, modeling and control of bioprocesses during the last 20 years. *Journal of Biotechnology*, 85, 149–173.
- [Spanjers et al., 1996] Spanjers, H., Vanrolleghem, P., & Olsson, G. (1996). Respirometry in control of the activated sludge process. *Water Science and Technology*, 34, 117–126.
- [Vanrolleghem, 2002] Vanrolleghem, P. A. (2002). *Principles of Respirometry in Activated Sludge Wastewater Treatment*. Universiteit Gent.
- [Vargas & Buitrón, 2008] Vargas, A. & Buitrón, G. (2008). Automation of acclimation phase in a sequencing batch reactor using dissolved oxygen regulation. *Biotechnology Processes*, 24, 1067–1074.
- [Vargas et al., 2011] Vargas, A., Moreno, J. A., & Mendoza, I. (2011). Time-Optimal Output Feedback Controller for Toxic Wastewater Treatment in a Fed-batch Bioreactor. In *IFAC world congress*.

- [Vargas et al., 2000] Vargas, A., Soto, G., Moreno, J., & Buitrón, G. (2000). Observer-Based Time-Optimal Control of an Aerobic SBR for Chemical and Petrochemical Wastewater Treatment. *Water Science and Technology*, 42(5-6), 163–170.
- [Venkateswarlu, 2004] Venkateswarlu, C. (2004). Advances in monitoring and state estimation of bioreactors. *Journal of Scientific and Industrial Research*, 63, 491–498.
- [Westmeier & Rehm, 1987] Westmeier, F. & Rehm, H. J. (1987). Degradation of 4-chlorophenol in municipal wastewater by adsorptiv immobilized *Alcaligenes sp. A 7-2*. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 26(78-83).
- [Yoong et al., 2000] Yoong, E. T., Lant, P. A., & Greenfield, P. F. (2000). In situ respirometry in an SBR treating wastewater with high phenol concentrations. *Water Research*, 34(1), 239–245.
- [Zielińska et al., 2012] Zielińska, M., Bernat, K., Cydzik-Kwiatkowska, A., & Wojnowska-Baryla, I. (2012). Respirometric activity of activated sludge in sequencing batch reactor depending on substrate and dissolved oxygen concentration. *Environment Protection Engineering*, 38, 41–49.