



Casa abierta al tiempo

**Universidad Autónoma Metropolitana**

**Azcapotzalco**

**Observabilidad y diseño de observadores no-lineales en  
producción de biocombustibles**

Doctorado en Ingeniería de Procesos

**PROPONENTE**

M. C. Hilario Flores Mejía

**ASESORES**

Dr. Héctor F. Puebla Núñez (UAM-Azcapotzalco)

Dr. Ricardo Aguilar López (CINVESTAV-Departamento de Biotecnología y  
Bioingeniería).

MAYO 2022

## Contenido

i. Lista de Acrónimos .....	6
Agradecimientos .....	7
Resumen.....	8
Capítulo 1 .....	9
<b>Introducción</b> .....	9
1.1. Motivación .....	9
1.2. Estado del arte .....	13
1.2.1. Observadores de estados.....	14
1.2.2. Análisis de observabilidad.....	16
1.2.3. Índice de observabilidad .....	17
1.3. Hipótesis y objetivos .....	18
1.3.1. Hipótesis.....	18
1.3.2. Objetivo general.....	18
1.3.3. Objetivos específicos.....	18
1.4. Organización de la tesis doctoral .....	19
1.5. Productos derivados del proyecto de tesis doctoral.....	19
1.5.1. Artículos científicos .....	19
1.5.2. Memorias en extenso.....	19
1.5.3. Presentaciones en congresos.....	20
Capítulo 2 .....	21
<b>Marco Teórico</b> .....	21
2.1. Procesos Biológicos .....	21
2.1.1. Biología celular .....	21
2.1.2. Procesos aerobios y anaerobios.....	22
2.1.3. Efecto de parámetros en procesos biológicos .....	23
2.2. Modelado de Procesos.....	24
2.2.1. Modelado de bioprocesos.....	24
2.2.2. Modelado de reacciones biológicas .....	25
2.2.3. Incertidumbre .....	26
2.3. Observabilidad .....	27
2.3.1 Observabilidad de un sistema lineal .....	28

2.3.1.1 Observabilidad de Kalman .....	28
2.3.1.2 Observabilidad por la prueba de PBH (Popov-Belevitch-Hautus).....	28
2.3.1.3 Observabilidad por el gramiano de observabilidad .....	29
2.3.1.4 Forma canónica observable .....	29
2.3.2 Observabilidad de un sistema no-lineal .....	30
2.3.2.1 Observabilidad por Linealización Exacta .....	30
2.3.2.2 Observabilidad con Diagrama de Inferencia .....	32
2.3.2.3 Observabilidad con el Mapeo de Observabilidad .....	33
2.3.2.4 Observabilidad Estructural .....	35
2.3.2.5 Observabilidad con base a un Gramiano Empírico .....	36
2.4 Índice de observabilidad .....	38
2.4.1 Invertibilidad de matrices y valores singulares .....	38
2.4.2 Índice de observabilidad .....	39
2.4.2 Grado de observabilidad .....	39
2.5. Estimadores de estados .....	40
2.5.1. Filtro de Kalman .....	41
2.5.2. Observador de Luenberger .....	42
2.5.3. Filtro Extendido de Kalman .....	44
2.5.4. Observador de Alta Ganancia .....	45
2.5.5. Observador de Modo Deslizante.....	46
Capítulo 3 .....	48
<b>Casos de Estudio</b> .....	48
3.1 Producción de hidrógeno por fotofermentación en un CSTR.....	48
3.1.1. Descripción del proceso .....	48
3.1.2. Foto-fermentación para producción de H <sub>2</sub> en un CSTR .....	49
3.1.3. Modelo Matemático .....	50
3.1.4. Simulaciones Numéricas .....	51
3.1.5 Linealización .....	53
3.2. Digestión Anaerobia de Lactosueros.....	54
3.2.1. Descripción del proceso .....	54
3.2.2. Producción de Biogás en un reactor secuencial lote anaerobio (AnSBR) .....	55
3.2.2. Modelo matemático.....	56

3.2.3. Simulación Numérica .....	58
3.3. Cultivo de microalgas .....	60
3.3.1. Descripción del proceso .....	60
3.2.2. Producción continua de microalgas en un quimiostato.....	60
3.5.2. Modelo Matemático .....	60
3.5.3. Simulación Numérica .....	62
3.5.4 Linealización .....	62
3.4. Producción de Biodiesel .....	63
3.4.1. Descripción del proceso .....	63
3.4.2. Producción de Biodiesel en un CSTR con grasas atrapadas .....	64
3.4.2. Modelo Matemático .....	65
3.4.3. Simulación Numérica .....	66
3.4.4 Linealización .....	67
Capítulo 4 .....	68
<b>Análisis de Observabilidad</b> .....	68
4.1. Metodología de Análisis de Observabilidad Propuesta .....	68
4.2. Observabilidad de la producción de hidrógeno por foto-fermentación en un CSTR.....	68
4.2.1. Mediciones disponibles.....	68
4.2.2. Análisis de Observabilidad Convencional: Prueba de Kalman y Criterio de PBH.....	69
4.2.3. Análisis de Observabilidad No Convencional .....	73
4.2.4 Índice de Observabilidad.....	81
4.3. Observabilidad de la Digestión Anaerobia de Lactosueros.....	82
4.3.1. Mediciones disponibles.....	82
4.3.2. Análisis de Observabilidad Convencional: Prueba de Kalman y Criterio de PBH.....	83
4.3.3. Análisis de Observabilidad No Convencional .....	85
4.3.4 Índice de Observabilidad.....	86
4.4. Microalgas .....	86
4.4.1. Mediciones disponibles.....	86
4.4.2. Análisis de Observabilidad Convencional: Prueba de Kalman y Criterio de PBH.....	87
4.4.3. Análisis de Observabilidad No Convencional .....	88
4.4.4 Índice de Observabilidad.....	89
4.5. Biodiesel .....	90

4.5.1. Mediciones disponibles.....	91
4.5.2. Análisis de Observabilidad Convencional: Prueba de Kalman y Criterio de PBH.....	91
4.5.3. Análisis de Observabilidad No Convencional.....	93
4.5.4 Índice de Observabilidad.....	94
Capítulo 5 .....	96
<b>Observadores</b> .....	96
5.1. Estimación de Estados No-Medibles en Foto-fermentación.....	96
5.1.1 Estructura general del observador.....	96
5.1.2 Observadores de Luenberger extendido y de modo deslizante de alto orden.....	96
5.1.3 Implementación y evaluación numérica de los observadores.....	97
5.2 Estimación de Estados en la Digestión Anaerobia de Lactosueros .....	100
5.2.1 Estructura general del observador.....	100
5.2.2 Observadores de Luenberger extendido y de modo deslizante de alto orden.....	101
5.2.3 Implementación y evaluación numérica de los observadores.....	101
5.3. Estimación de Estados No-Medibles en la Producción de Microalgas.....	105
5.3.1 Estructura general del observador.....	105
5.3.2 Observadores de Luenberger extendido y de modo deslizante de alto orden.....	105
5.3.3 Implementación y evaluación numérica de los observadores.....	106
5.4. Estimación de Estados No-Medibles en la Producción de Biodiesel.....	108
5.4.1 Estructura general del observador.....	108
5.3.2 Observadores de Luenberger extendido y de modo deslizante de alto orden.....	108
5.3.3 Implementación y evaluación numérica de los observadores.....	109
Capítulo 6 .....	112
<b>Conclusiones y recomendaciones</b> .....	112
6.1. Panorama general .....	112
6.2 Contribuciones principales.....	113
6.3 Líneas de investigación abiertas.....	114
Bibliografía .....	115

## **i. Lista de Acrónimos**

Debido a su aceptación universal los acrónimos se derivan de sus siglas en ingles.

AD.....Digestión Anaerobia

ANN.....Redes Neuronales Artificiales

ATP.....Trifosfato de Adenosina

CSTR.....Reactor Continuo de Tanque Agitado

DQO.....Demanda Química de Oxígeno

IMC.....Control de Modo Interno

NADH.....Dinucleótido de Nicotinamida y Adenina

NADPH.....Nicotinamida Adenina Dinucleótido Fosfato

ODE.....Ecuación Diferencial Ordinaria

PID.....Proporcional-Integral-Derivativ

PNSB.....Bacterias Moradas no Azufradaso

SMO.....Observadores de Modo Deslizante

UASB.....Reactor Anaerobio de Flujo Ascendente Con Manto De Lodos

AGV's.....Acidos Grasos Volátiles

## Agradecimientos

Primeramente, quiero agradecer a Dios por darme la oportunidad de concluir esta etapa tan importante en mi vida profesional.

A mi familia, principalmente a mi madre Isabel (QEPD), quien ya no pudo ver la culminación de este proyecto.

A mi compañera de vida Alejandra y a su familia.

A mis asesores los doctores Héctor Puebla y Ricardo Aguilar, y a todos mis profesores y compañeros del posgrado en Ingeniería de Procesos.

Agradezco también a la Universidad Autónoma Metropolitana y al CONACyT los apoyos otorgados para realizar los estudios de doctorado en Ingeniería de Procesos.

## Resumen

Uno de los mayores obstáculos para el diagnóstico, monitoreo y control de bioprocesos es la ausencia de sensores para la medición de variables clave que tengan las siguientes características: (i) en línea, (ii) confiables, (iii) no intrusivos, (iv) esterilizables, y (v) con buenas propiedades de robustez. Las variables clave en la mayoría de bioprocesos incluyen la carga orgánica, las especies de microorganismos, las concentraciones de metabolitos o productos intermedios y las velocidades de reacción. En la literatura se han propuesto los sensores suaves u observadores de estados para la estimación de estados no medibles en una gran cantidad de bioprocesos. Un observador de estados es un sistema dinámico que reconstruye estados no medidos de un sistema con base a un modelo dinámico del sistema y de las mediciones disponibles. Un análisis previo al diseño del observador es la propiedad de observabilidad, la cual se ha estudiado usando diferentes aproximaciones. Sin embargo, la más común es la que se basa en el criterio de observabilidad con base a una linealización del modelo original en un punto de operación dado, por lo general en los puntos de equilibrio del proceso. En la actualidad estas técnicas se han complementado con otras técnicas de diferentes áreas, como los diagramas de inferencia. Existe una gran cantidad de diseño de observadores, tales como los observadores clásicos de Luenberger y filtros de Kalman que garantizan convergencia asintótica de los estados estimados a los reales considerando un modelo perfecto y que se cumple la propiedad de observabilidad en su aproximación lineal. Para tratar con incertidumbres del modelo se han propuesto extensiones o modificaciones a los observadores anteriores, así como otras propuestas tales como observadores difusos, adaptables, y de tipo modo deslizante. El interés de este proyecto de investigación doctoral es profundizar en el estudio de la observabilidad y el diseño de los observadores más adecuados para bioprocesos en producción de biocombustibles. En particular, la investigación se centra en tres aspectos: (i) El análisis de observabilidad no-lineal con base a diferentes enfoques reportados en la literatura. (ii) La variabilidad de las propiedades de la observabilidad en diferentes regiones de operación. (iii) La aplicación de diferentes técnicas de estimación de estados a diferentes casos de estudio. Debido a su relevancia e interés actual, la clase de bioprocesos considerados son los biocombustibles, sin embargo, las metodologías y resultados reportados se espera que sean aplicables a una amplia clase de bioprocesos.

# Capítulo 1

## Introducción

En este Capítulo se presenta la motivación del tema de tesis, la observabilidad y el diseño de observadores para comunidades microbianas. Se identifica la problemática en esta clase de procesos y se establecen las hipótesis. Posteriormente, se definen los objetivos del trabajo de tesis. Finalmente, se presenta la estructura general del documento.

### 1.1. Motivación

El desarrollo y crecimiento de la sociedad ha generado una demanda de energía con la finalidad de mantener y mejorar los niveles estándar de vida. Desde 1920, la principal fuente de energía empleada han sido los combustibles fósiles (Demirbas, 2009). Actualmente, los combustibles fósiles representaron alrededor del 80% del consumo total de energía (Gadonneix et al., 2010; SENER 2015). Los combustibles fósiles presentan el inconveniente de ser recursos no renovables. Además, su consumo y procesamiento generan altas cantidades de emisiones contaminantes.

Los combustibles alternos incluyen los denominados biocombustibles, denominados así debido a que se obtienen a partir de biomasa (Demirbas, 2003). La biomasa se refiere a todos los materiales orgánicos que en algún momento se obtuvieron natural o artificialmente por medio del proceso de fotosíntesis, esto incluye productos agrícolas y silvestres, productos de desechos animales, etc. Los beneficios de los biocombustibles incluyen (Demirbas, 2003; Demirbas, 2009): la sustentabilidad, la reducción de gases de efecto de invernadero, el desarrollo rural y asegurar el abasto de combustibles.

Los biocombustibles de mayor interés actual son (Demirbas, 2009; Gadonneix et al., 2010; SENER 2015):

(i) Biodiesel: El cual se obtiene por la reacción de transesterificación de lípidos que pueden provenir de aceites vegetales, aceites vegetales residuales de la preparación de alimentos, grasas animales de desecho o aceites de microalgas. En el proceso de producción se obtiene biodiesel y agua como productos principales del proceso de esterificación.

(ii) Bioetanol: El cual se obtiene por medio de la fermentación anaerobia de azúcares. Actualmente se trabaja en el desarrollo de procesos para obtenerlos a partir de desechos agrícolas como las pajas de maíz y trigo, o el bagazo de caña que son residuos producidos en grandes cantidades.

(iii) Biogás: El cual se obtiene principalmente por medio de las reacciones de degradación de materia orgánica mediante microorganismos (bacterias acidogénicas, metanogénicas, etc.) en condiciones anaerobias (en ausencia de oxígeno). El producto de consta principalmente de metano ( $\text{CH}_4$ ) en proporción que va del 40 al 70%, dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) y pequeños porcentajes de otros gases como oxígeno, nitrógeno, hidrogeno y sulfuro de hidrogeno ( $\text{H}_2\text{S}$ ).

(iv) Biohidrógeno: El cual se produce principalmente por bacterias a través de la fermentación de ácidos orgánicos (e.g. ácido acético, butírico y propanoico), los cuales se pueden obtener de aguas residuales o residuos agrícolas.

Los procesos biotecnológicos, incluyendo los asociados a la producción de biocombustibles, se han usado por más de un siglo, sin embargo, en muchos casos aún se operan en forma empírica, principalmente por la complejidad de los fenómenos de transporte y reacción subyacentes. Más aun, muchas de las variables clave en la operación de bioprocesos no se pueden medir en forma instantánea por la ausencia de sensores adecuados (Wiese y König, 2009).

En términos generales, un sistema de monitoreo adecuado es necesario para (Bequette, 2003; Chanda et al., 2015):

- Mejorar el entendimiento del proceso: El contar con mediciones confiables puede revelar relaciones desconocidas entre variables, las cuales conducen al desarrollo de mejores modelos fenomenológicos.
- Toma de decisiones: La disponibilidad de mediciones de variables importantes permiten la detección oportuna de problemas operacionales.
- Diseño e implementación de sistemas de control: Para el diseño e implementación de sistemas de control es deseable contar con la medición instantánea de la variable a controlar para diseños de control por retroalimentación de salida. Para otros enfoques de control, tales como el control de modo predictivo, es necesario conocer todos los estados del modelo que se usa para la predicción.

Las variables principales de bioprocesos son comúnmente las concentraciones de los substratos a procesar, la biomasa y sus componentes, y los productos. El monitoreo de la concentración no es una tarea sencilla. En efecto, en la medición estándar de la concentración se sigue el siguiente procedimiento: (i) Se toma una muestra a intervalos de tiempo definido. (ii) Las muestras se manipulan y analizan por métodos fuera de línea tales como titulación o cromatografía.

Algunas técnicas de medición más avanzadas incluyen la espectroscopia vibracional, espectroscopia de masas, y resonancia magnética (Chanda et al., 2015). En particular la espectroscopia de masas acoplada con diferentes fuentes de ionización proporciona información estructural de la composición de productos en tiempo real (Ray et al., 2018).

Algunas variables claves comunes de diversos bioprocesos y sus mediciones son:

- Demanda química de oxígeno (DQO): Métodos de titulación de permanganato o dicromato, y espectrofotometría.
- Ácidos grasos volátiles (VFA): Espectroscopia de fluorescencia, espectroscopia cercana al infrarrojo (NIR), titulación, y cromatografía de gases.
- Composición de biogás (CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S, N<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>): Cromatografía de gases, sensores en línea (por Siemens) para CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub>, y celdas electroquímicas.

Los métodos cromatográficos y espectroscópicos son costosos en términos de su adquisición y mantenimiento. Además, se requiere cumplir con especificaciones operacionales estrictas (calibración, esterilización, muestreo, etc.). Así, algunas desventajas de los métodos anteriores son el tiempo de medición, requieren materiales costosos, corrosivos y tóxicos, equipos costosos, y con accesorios especializados. A pesar de que se ha realizado un esfuerzo considerable para el desarrollo de sensores que permitan el monitoreo en línea y rápido de variables en bioprocesos, actualmente, las mediciones rutinarias son las mediciones de presiones, flujos volumétricos de líquidos y gases, temperatura, *pH*, y conductividad. Así, uno de los objetivos principales en procesos biotecnológicos es el desarrollo de dispositivos eficientes que permitan el monitoreo indirecto de variables clave a través de mediciones en línea y en forma rápida que están disponibles y con bajo costo económico y computacional.

Los métodos que se han propuesto en la literatura para el monitoreo indirecto de variables se pueden agrupar en tres categorías:

1. Correlaciones con mediciones disponibles: La idea es establecer una correlación directa de la medición deseada con alguna variable disponible, tal como la conductividad, el *pH* y el oxígeno disuelto. Sin embargo, solamente existen pocas correlaciones identificadas.
2. Técnicas basadas en datos históricos (Kadlec et al., 2009; Russell et al., 2012): En esta clase de técnicas se utilizan los datos históricos de mediciones disponibles para construir un modelo que permita inferir la medición de la variable de interés. En esta clase de técnicas se incluyen las redes neuronales artificiales (ANN), máquinas soportadas por vectores, modelos regresivos, y recientemente,

el análisis fractal. Por ejemplo, en una ANN se trata de emular en forma artificial la forma en la que las neuronas reconocen patrones, aprenden tareas y resuelven problemas. En particular, las ANN se basan en la característica que una neurona se activa después de exceder cierto umbral. Las ANN se caracterizan por el número y tipo de conexiones entre nodos o neuronas, y las reglas de aprendizaje que se usan a partir de un conjunto de datos para su entrenamiento. Las ANN se han usado en bioprocesos para estimar la COD, eficiencias de remoción de contaminantes, y composiciones de biogás. Las desventajas de las ANN incluyen la selección de variables y cantidad de datos para fines de entrenamiento, la etapa de reaprendizaje al llegar datos con características distintas al entrenamiento, y su uso como modelos de caja negra donde no se identifican fenómenos de transporte y reacción relevantes. En el caso del análisis fractal, la idea es establecer correlaciones entre los parámetros fractales y el comportamiento cualitativo de variables clave en bioprocesos. Un par de desventajas de este enfoque son la necesidad de experiencia en el manejo del análisis fractal para la selección de parámetros de ajuste del método, y las características de las series de tiempo en cantidad de datos, su muestreo y su relación con las variables a estimar. En términos generales, las técnicas basadas en datos son una alternativa adecuada cuando no existe un modelo o bien el modelo disponible es demasiado complejo.

3. Técnicas basadas en modelo (Dochain, 2003; Bogaerts y Wouwer, 2003; Luttmann et al., 2012; Ali et al., 2015; Alexander et al., 2020): Esta clase de técnicas se basan en modelos matemáticos que describan el proceso de interés. En esta clase de técnicas, la que se basa en los denominados estimadores u observadores de estados es la más destacable. Un estimador de estados u observador es un sistema dinámico que estima los estados no medibles de un sistema, a partir de un modelo dinámico base del sistema y las mediciones disponibles. Un requisito fundamental para el diseño de un observador es el contar con un modelo que describa en forma apropiada a las variables principales del proceso. Por otro lado, previo al diseño del observador se requiere estudiar la propiedad de observabilidad. En este caso, las condiciones de observabilidad rigurosas son difíciles de probar. Además, la prueba de observabilidad lineal convencional está restringida a una región cercana al punto de aproximación del modelo lineal, y puede cambiar sus propiedades de acuerdo con la región de

operación del bioproceso. Si bien, existe una vasta literatura de estimación en bioprocesos, sin embargo, en muchos casos se omite el análisis de observabilidad correspondiente, o los diseños de observadores son adaptaciones de aplicaciones en otra clase de sistemas sin considerar la estructura y naturaleza de los modelos de bioprocesos.

En este proyecto de investigación, el interés son las técnicas de observadores de estados y su aplicación a una clase de bioprocesos que han generado un interés académico y práctico en años recientes, la producción de biocombustibles. Los observadores de estados presentan las siguientes ventajas en la estimación de estados comparados con otras técnicas:

- (i) Comparadas con las técnicas basadas en datos requieren una menor demanda computacional y mediciones. Además, no se requiere el preprocesamiento de datos, diseño de una arquitectura para su procesamiento, y etapas de entrenamiento.
- (ii) Al hacer uso de un modelo fenomenológico del proceso, la interpretación física de los resultados es más intuitiva o no es tipo caja negra como los modelos basados en datos.
- (iii) Los modelos de bioprocesos son comúnmente una simplificación de la gran complejidad de esta clase de procesos que conducen a modelos manejables para esta clase de técnicas.

Con base a lo anterior, en este proyecto de investigación se pretende estudiar y asociar las características de los modelos de bioprocesos con el análisis de la observabilidad y el diseño de los observadores más adecuados. Más aun, con la finalidad de extender la aplicación de observadores de estados en bioprocesos, se consideran cuatro casos de estudio de interés académico e industrial de producción de biocombustibles para la estimación de sus variables clave: (i) Producción de biohidrógeno. (ii) Producción de biogás. (iii) Producción de microalgas. (iv) Producción de biodiesel.

## 1.2. Estado del arte

En esta sección se proporciona una revisión del estado del arte de tres aspectos relacionados al trabajo de investigación: **(i)** La aplicación de observadores de estados en bioprocesos. **(ii)** El análisis de observabilidad. **(iii)** El índice de observabilidad.

### 1.2.1. Observadores de estados

En la literatura se han propuesto varios diseños de observadores, incluyendo los observadores clásicos de Luenberger y de Kalman, los cuales garantizan convergencia asintótica de los estados estimados si el modelo se considera perfecto (Dochain, 2003; Ali et al., 2015). Una de las limitaciones de los observadores clásicos es la falta de robustez en la estimación de estados no medibles debido a modelos con incertidumbre. Con la finalidad de incluir la incertidumbre en el modelo del sistema, se han propuesto las versiones extendidas o mejoradas de observadores de Luenberger y de Kalman (Ali et al., 2015; Alexander et al., 2020). Sin embargo, estas configuraciones están restringidas a ciertas clases de incertidumbres y pueden requerir cálculos elaborados para su diseño.

Algunas aplicaciones de observadores clásicos en bioprocesos son los siguientes:

- Rapaport et al., (2008) diseñan un observador de tipo Luenberger en su aplicación a un modelo de un quimioestato (reactor tipo tanque agitado para aplicaciones de laboratorio), para estimación parámetros no constantes.
- Rodríguez Núñez et al., (2015) hacen el análisis de desempeño de observadores tipo Luenberger y no lineales a un modelo típico de un fermentador.
- Dewasne et al., (2019) formulan un observador continuo-discreto para entradas exógenas y entradas desconocidas basado en un filtro de Kalman extendido. El desempeño del observador propuesto usa como medición de salida el flujo de metano y se implementó en un modelo de digestión anaerobia de cuatro estados de una planta piloto de digestión anaerobia.
- Duan y Kravaris (2020) exploran una escala de dos tiempos de un sistema no lineal para proponer el diseño de un observador no lineal con una metodología basada en un observador de Luenberger. Consideran un modelo de digestión anaerobia de cuatro estados como caso de estudio y la salida medible es la concentración de biomasa total y los ácidos grasos volátiles.

Los diseños de observadores que incluyen el modelo no-lineal del proceso incluyen versiones extendidas del observador de Luenberger y observadores no-lineales que se derivan usando diferentes enfoques. Aplicaciones en bioprocesos se han reportado por los siguientes autores.

- Kazantzis et al., (2001) proponen el diseño de un observador no lineal en tiempo discreto y su aplicación a un modelo típico de un biorreactor.

- López Pérez et al., (2013) diseñan un observador no-lineal para estimar la concentración de etanol, la concentración de biomasa, y la concentración de enzimas en un proceso de producción de bioetanol.
- Didi et al., (2014) diseñan un observador no lineal de tipo Luenberger para la estimación de estado del modelo denominado AM2 de la digestión anaerobia, usando mediciones de varios sustratos.
- Rodriguez et al., (2015) realizan una estimación simultanea de estados y parámetros cinéticos para el modelo AM2. Ellos proponen un observador adaptivo exponencial explotando una estructura en cascada del modelo usando mediciones de sustratos.
- Lara-Cisneros et al. (2016) usan un observador no-lineal de tipo sigmoide para la estimación de la salida de AGV's, utilizando la tasa de flujo de metano como la salida medible. El caso de estudio es un digestor anaerobio modelado con el modelo AM2.

Otra propuesta de diseño de observadores con buenas propiedades de robustez son los observadores de modo deslizante (SMO). En los SMO se utiliza una acción discontinua para forzar las trayectorias de los estados a estimar a una zona denominada superficie deslizante, en la cual se garantiza que el error de estimación converge a cero. Algunas aplicaciones de SMO en bioprocesos son los siguientes:

- Aguilar López y Maya Yescas (2005) utilizan observadores de modo deslizante para sistemas no lineales con parámetros inciertos.
- Floquet y Barbot (2007) aplicaron un algoritmo *super twisting* para sistemas no lineales con entradas desconocidas.
- Nuñez et al., (2012) abordan el problema de estimación de biomasa en un proceso de producción de biohidrógeno usando un observador de modo deslizante.
- Lara-Cisneros et al., (2016) Formulan un observador de tipo *super twisting* y lo aplican a modelo de digestión anaerobia de dos estados, para estimar la concentración de AGV's, usando el flujo de gas metano como la variable medible.
- Zuñiga et al., (2015) aplicaron un observador de Luenberger acoplado a un observador de modo deslizante para estimar las concentraciones de sustrato y biomasa en un biorreactor para producción de biohidrógeno.
- Sbarciog et al., (2014) Aplicaron un observador *super twisting* tomando un modelo de referencia de digestión anaerobia introducido por Bernard (modelo AM2). Para propósitos de estimación, los autores consideran la medición del sustrato y la tasa de flujo del biogás.

Finalmente, otros enfoques de observadores son los de tipo difuso, polinomiales, de intervalos. Algunas aplicaciones en bioprocesos son las siguientes:

- Chaib Draa et al., (2018) diseñaron una matriz de desigualdades lineales (LMI) basado en un observador de estado no lineal de tiempo discreto  $H^\infty$ . El observador de estado propuesto da todas las variables de estado usando las mediciones del sustrato orgánico, AGV's y alcalinidad, esto para un modelo de seis estados.
- Alcaraz-González et al. (2005) proponen la aplicación de observadores de intervalos para la estimación de cuatro estados no medibles en un modelo de seis estados, con base a las mediciones de sustrato y AGV's.
- Bunciu (2011) realiza estimación de biomasa de un proceso anaeróbico usando un observador por intervalos.

### **1.2.2. Análisis de observabilidad**

La propiedad de observabilidad es un pre-requisito para la estimación de estados no medibles. La observabilidad es una propiedad que estudia la posibilidad de determinar los estados no-medibles en forma única usando solamente el conocimiento de la entrada de control y de las salidas del sistema (Pruneda et al., 2010).

El primer acercamiento para estudiar la observabilidad se basa en usar modelos lineales o linealizados del proceso en un punto de operación y calcular la denominada matriz de observabilidad de Kalman que conduce a resultados validos localmente (alrededor del punto de linealización o donde es válido el modelo lineal). El gramiano de observabilidad y el criterio de Popov-Belevith-Hautus son resultados equivalentes a la observabilidad de Kalman para sistemas lineales (Callier y Desoer, 2012). Una observabilidad local es a menudo suficiente y puede conducir a resultados incompletos respecto al comportamiento no-lineal del proceso en diferentes regiones de operación. En efecto, debido a que los bioprocesos son altamente no-lineales, tales aproximaciones de la observabilidad pueden conducir a resultados imprecisos.

La observabilidad para sistemas no-lineales no es fácil de establecer y es un problema abierto (Dochain 2003). Una propuesta para abordar el análisis de observabilidad para sistemas no lineales es una condición equivalente a la condición de rango de la matriz de observabilidad de Kalman, pero usando derivadas de Lie para su cálculo (Luttman et al., 2012). Debido a que los cálculos de esta matriz se complican para sistemas de alto orden y con no-linealidades importantes, tales como los bioprocesos, no es común que se presente este análisis.

En el caso de bioprocesos, pocos autores han abordado las propiedades de observabilidad. Algunas contribuciones relevantes son las siguientes:

- Didi et al., (2014) y Rodriguez et al., (2015) Ambos presentan un análisis de observabilidad basado en la condición de rango usando derivadas de Lie.
- Moreno et al., (2014) llevan a cabo los análisis de observabilidad en su aplicación a modelos de procesos bioquímicos.
- Golabgir et al., (2015) hacen análisis de observabilidad construyendo a matriz de observabilidad con derivadas de Lie, en su aplicación a un proceso de obtención de penicilina.
- Lara-Cisneros et al., (2016) y Lara Cisneros y Dochain (2018) consideran la observabilidad algebraica en sus trabajos.
- Vaidyanathan, (2016) presentan en el análisis de observabilidad clásica con aplicación a modelos de sistemas biológicos.
- Lecca y Ree., (2019) proponen una metodología basada en menores principales para identificar condiciones de observabilidad local en procesos bioquímicos.

En años recientes, en la literatura de teoría de control, se han propuesto nuevas formas de estudiar la observabilidad de sistemas no-lineales. Tres de estos enfoques son:

1. Un método grafico usando diagramas de incidencia que permite establecer las conexiones entre los estados y las mediciones. (Liu y Slotine, 2013).
2. El mapeo de observabilidad para sistemas no lineales (Lecca y Ree, 2019) que proporciona una condición global de observabilidad, teniendo en cuenta todos los estados del sistema y derivadas sucesivas de la variable medida. En forma similar, Montanari y Aguirre (2020) proponen el estudio de la observabilidad global y local a través de un mapeo de observabilidad con derivadas de Lie de la variable medida.
3. El gramiano empírico, que extiende el concepto del gramiano lineal a sistemas no lineales (Singh y Hann, 2005). La metodología del gramiano empírico evita el procedimiento de linealización y se basa solo en la simulación del sistema no lineal.

Hasta el mejor conocimiento del autor, tales metodologías no se han aplicado a bioprocesos para la producción de biocombustibles.

### **1.2.3. Índice de observabilidad**

Al estudiar la propiedad de observabilidad se debe considerar que, debido a variaciones en los parámetros del modelo, un sistema observable puede llegar a ser no-observable. Más aun, algunas regiones de operación físicamente factibles pueden ser menos observables

que otras. Por ejemplo, en el caso de bioprocesos, la naturaleza cambiante de los microorganismos puede impactar en el análisis de observabilidad local. Por ejemplo, la cinética convencional de crecimiento de microorganismos es a través de una cinética de Monod, la cual es de orden variable de acuerdo con la cantidad de sustrato presente. Así, es deseable extender el análisis de observabilidad local a diferentes regiones de operación.

En la literatura, se propuso el concepto de índice de observabilidad para cuantificar el grado de observabilidad. Los índices de observabilidad se basan principalmente en los valores singulares de la matriz de observabilidad (Montanari y Aguirre, 2020). Tales índices de observabilidad se han aplicado a problemas en ingeniería mecánica y eléctrica, sin embargo, la aplicación de estas ideas en el área de bioprocesos no ha recibido mucha atención (Golabgir et al., 2015).

## **1.3. Hipótesis y objetivos**

### **1.3.1. Hipótesis**

**H1** El estudio de las propiedades de observabilidad no-lineal en bioprocesos permiten una selección adecuada de las mediciones clave para fines de diagnóstico y control.

**H2** La variabilidad de la propiedad de observabilidad en diferentes regiones de operación permite identificar potenciales problemas de monitoreo en la producción de biocombustibles.

**H3** La aplicación de observadores de estados no-lineales en la producción de biocombustibles permiten la estimación de variables clave con una selección adecuada de la variable medible.

### **1.3.2. Objetivo general**

Identificar las variables medibles que permita un monitoreo indirecto de los estados no medibles por medio de observadores de estados y un buen desempeño del observador aplicados a la producción de biocombustibles.

### **1.3.3. Objetivos específicos**

- Estudiar las problemáticas de la estimación de estados en la producción de biocombustibles.
- Aplicar diferentes técnicas de observabilidad lineales y no-lineales para procesos de producción de biocombustibles.

- Estudiar la variabilidad de la propiedad de observabilidad en diferentes regiones de operación a través de diferentes índices de observabilidad en procesos de producción de biocombustibles.
- Emplear diferentes observadores de estado lineales y no-lineales en la producción de biocombustibles para la estimación de variables clave.

#### 1.4. Organización de la tesis doctoral

Esta tesis se organiza como sigue: En el Capítulo 2 se describen los conceptos y herramientas principales que sustentan este trabajo. En el Capítulo 3 se presentan las generalidades de los casos de estudio, incluyendo la descripción de los modelos matemáticos. En el Capítulo 4 se estudian las propiedades de observabilidad de los casos de estudio, incluyendo el índice de observabilidad. En el Capítulo 5 se presenta el diseño de diferentes esquemas de estimación de estados. Finalmente, en el Capítulo 6 se establecen las contribuciones principales de este trabajo de investigación y se establecen líneas de trabajo abiertas.

#### 1.5. Productos derivados del proyecto de tesis doctoral

Derivado de los resultados que se obtienen en este proyecto de investigación se realizaron las siguientes aportaciones al estado del arte del tema:

##### 1.5.1. Artículos científicos

- **Flores-Mejía, H.**, Lara-Musule, A., Hernández-Martínez, E., Aguilar-López, R., & Puebla, H. (2021). *Indirect Monitoring of Anaerobic Digestion for Cheese Whey Treatment*. *Processes*, 9(3), 539.
- **Flores-Mejía, H.**, Hernández-Martínez, E., Aguilar-López, R., & Puebla, H. (2022). *Observability analysis in biodiesel production processes*. En preparación.

##### 1.5.2. Memorias en extenso

- **Flores-Mejía, H.**, Rodríguez-Jara, M., Aguilar-López, R., Puebla, H. (2021). *Análisis de observabilidad no lineal en producción de H<sub>2</sub> por fotofermentación*. Memorias del Congreso Nacional de Control Automático 2021, Vol. 1, 21-26. Guanajuato, Guanajuato (Virtual).

- **Flores-Mejía, H.**, Aguilar-López, R., Puebla, H. (2021). *Monitoreo de un foto-fermentador para la producción de hidrogeno: observabilidad y diseño de observador*. Memorias del Congreso Internacional de Energía 2021 Vol. 1. 449-455. Queretaro, Queretaro (Virtual).
- **Flores-Mejía, H.**, Puebla, H., Aguilar-López, R., Hernández-Martínez, E. (2019). *Análisis de observabilidad de reactores biológicos para producción de biogas*. Memorias del Congreso Internacional de Energía 2019 Vol. 1, Morelia, Michoacán.

### 1.5.3. Presentaciones en congresos

- **Flores-Mejía, H.**, Aguilar-López, R., Puebla, H. (2021). *Monitoring biodiesel production: observability analysis and observer designs*. 9th International Forum on Industrial Bioprocessing (IBA-IFIBIOP 2021), Saltillo, Coahuila, September 12-15.
- **Flores-Mejía, H.**, Vian-Pérez, J.G., Aguilar-López, R., Puebla, H. (2019). *State Observer Designs in Bioprocesses for Biofuel Production: A review*. 2nd International Conference on Renewable Energy and Environment Engineering (REEE 2019), Munich, Germany, August 19-22, 2019.
- Puebla, H., Hernández-Martínez, E., **Flores-Mejía, H.**, Rocha-Lara, C., Aguilar-Lopez, R., Flores-Guzman, N. (2018). *Diagnostics and Monitoring of Bioprocesses for Biofuel production using Non-Conventional Approaches based on Fractal Analysis, State Observers, and Neural Networks*. International Conference on Trends in Computer Engineering Information Technology & Applied Sciences (ITCIA-18), Londres, UK, Mayo 12-13, 2018.

## Capítulo 2

### Marco Teórico

En este Capítulo se presenta el soporte teórico de los conceptos y herramientas principales que se usan en este trabajo. Primero se presenta una revisión de conceptos de bioprocesos y su problemática de mediciones. Posteriormente, se introducen conceptos y herramientas de observabilidad y de diseño de observadores.

### 2.1. Procesos Biológicos

En años recientes, se ha incrementado el uso de microorganismos (bacterias, hongos, algas), así como de células humanas, vegetales o animales, para la producción de una gran gama de productos de interés comercial, tales como antibióticos, biocombustibles, alimentos y bebidas, etc. (Rai et al., 2019; Srivastava et al., 2020). Además, su aplicación para el tratamiento de aguas residuales y contaminantes sólidos con alto contenido de materia orgánica ha demostrado ser atractiva desde el punto de vista ambiental (Barragán-Ocaña et al., 2020). Por otra parte, para un buen aprovechamiento de estos procesos biológicos se necesita un mejor entendimiento de su dinámica, la cual es altamente compleja.

#### 2.1.1. Biología celular

Las células, tejidos y organismos, tienen como base estructural miles de moléculas. Las cuales se pueden agrupar en ciertas categorías por sus semejanzas estructurales: azúcares, lípidos, y proteínas. Las proteínas realizan la mayoría de las funciones en un organismo viviente. Las proteínas están compuestas por carbono, oxígeno, hidrógeno, y nitrógeno (Bailey y Ollis, 1987).

Las proteínas son las piezas funcionales de la maquinaria celular. Por ejemplo, las proteínas son las que, en las membranas, se encargan de identificar y permitir el paso de sustancias hacia uno y otro lado y son las que, como enzimas, se encargan de acelerar miles de reacciones químicas de las que depende la vida de la célula, así como de muchas otras funciones (Bailey y Ollis, 1987; Doran, 1995).

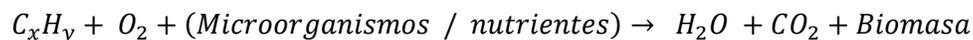
El metabolismo celular se puede considerar como una serie de rutas de reacciones químicas, que se forman por una gran cantidad de moléculas que se transforman constantemente (Bailey y Ollis, 1987; Doran, 1995). Estas rutas reciben a las que llegan al

organismo o a la célula del exterior, pero además tienen sus propias moléculas. Se pueden distinguir dos procesos, en uno de ellos, el anabolismo, a partir de moléculas pequeñas se obtienen otras más grandes; en el otro, el catabolismo a partir de moléculas grandes se obtienen otras más pequeñas. Una característica importante del proceso metabólico es que, en el catabolismo de las moléculas pequeñas, como la glucosa, los ácidos grasos o los aminoácidos, se logra transformar la energía de sus enlaces químicos en la energía de los enlaces del ATP y otras sustancias, que proporcionan en forma directa la energía que requieren las células para todas sus funciones. Además, los procesos de síntesis, tanto de moléculas sencillas como de macromoléculas, requieren energía, la cual proviene del ATP y del poder reductor que tienen las moléculas llamadas NADH y NADPH, entre otras. Es interesante señalar que la degradación que sufren las macromoléculas para producir las unidades que las componen hace que se transforme en calor toda la energía de sus enlaces (Bailey y Ollis, 1987; Doran, 1995).

Otra característica del metabolismo es que cada una de sus transformaciones se acelera casi invariablemente por una enzima diferente. Las enzimas son proteínas y son las moléculas que se encargan de catalizar (es decir, de acelerar) las reacciones individuales del metabolismo. Aunque las reacciones químicas de muchos pasos metabólicos pueden ocurrir en forma espontánea, prácticamente todas ellas transcurrirían con una enorme lentitud si no existieran las enzimas. Éstas aceleran mucho (habitualmente mucho más de un millón de veces) las reacciones individuales del metabolismo.

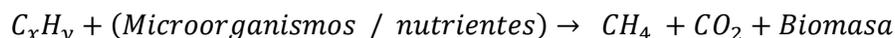
### 2.1.2. Procesos aerobios y anaerobios

Los procesos biológicos se clasifican en forma general como aerobios y anaerobios. Los procesos aerobios se pueden representar como,



Es decir, los sistemas aeróbicos aprovechan la capacidad de los microorganismos de asimilar materia orgánica y nutrientes (nitrógeno y fósforo) para su propio crecimiento, en presencia de oxígeno. Los productos resultantes son agua, dióxido de carbono, y materia orgánica degradada o transformada.

Los procesos anaerobios se pueden representar como,



En el caso de los procesos anaerobios no es necesario el oxígeno para llevar a cabo el metabolismo de degradación o consumo de la materia orgánica, con la generación simultánea de un biogás compuesto por metano y dióxido de carbono.

### 2.1.3. Efecto de parámetros en procesos biológicos

El diseño y la operación de un proceso biológico dependen de varios parámetros. A continuación, se describen los efectos principales de los más importantes (Bailey y Ollis, 1987; Doran, 1995):

1. Cantidad de nutrientes disponibles: Este parámetro involucra macronutrientes y micronutrientes (carbono, nitrógeno, fósforo y azufre), ambos muy importantes para el crecimiento de los microorganismos. Además, su ausencia puede generar la inhibición en el proceso (Al Seadi, 2008).

2. Concentración de oxígeno disuelto (procesos aeróbicos): La ausencia de este parámetro dentro de un reactor aeróbico es causa inmediata de disminución de la población de microorganismos presentes por lo tanto no se puede generar productos. Además, los microorganismos requieren de oxígeno para poder metabolizar el alimento que consumen.

3. Relación entre carga orgánica y microorganismos: El incremento de la carga orgánica puede ocasionar fallas en los reactores químicos ya que es la cantidad de materia que alimenta por unidad de volumen en un tiempo determinado. Si esta carga es menor a la necesaria los microorganismos no se alimentan correctamente y habrá una disminución de estos. Por el contrario, si la carga es mayor a la necesaria puede haber un sobre incremento en la población de microorganismos o bien los microorganismos podrían ser arrastrados a la salida del reactor.

4. *pH*: Tiene efectos significativos en las rutas metabólicas por lo que está altamente relacionada con la generación del producto final. En un proceso cuyo *pH* es por debajo de 5 la producción se ve reducida debido a la producción de metabolitos ácidos, que destruye la capacidad de la célula para mantener el *pH* interno. Estudios demuestran que el *pH* óptimo depende tanto del tipo de microorganismo como de los sustratos (Nath et al., 2006). El *pH* que puede considerarse comúnmente óptimo para muchos bioprocesos está entre 6.5 y 7.6. Si el *pH* está por arriba de 7.8 indica acumulación de amoníaco (Al Seadi, 2008).

5. Temperatura: Los procesos biológicos se llevan a cabo en gran medida a temperatura ambiente. De las diferentes etapas térmicas como son psicofílica, mesofílica y termofílica, comúnmente se considera la termofílica (entre 43 y 55 °C), debido a que

dentro de esta zona existe la eliminación de patógenos, crecimiento de la población y una degradación de sustratos sólidos en un tiempo de retención menor. La desventaja de esta zona es la inestabilidad, hay mayor consumo de energía y riesgo de inhibición por amoníaco (Riffat, 2013).

**6. Tiempo de residencia:** está definido como el tiempo que pasa una porción de líquido desde que entra al reactor hasta que sale del mismo. En procesos biológicos este parámetro es muy importante ya que si no es suficiente la población de microorganismos no consume la cantidad suficiente de sustrato y no se genera la cantidad optima de productos (Al Seadi, 2008).

**7. Mezclado:** El mezclado es importante para asegurar una mezcla homogénea y eliminar las resistencias al transporte de masa. Sin embargo, un aumento excesivo de este parámetro perjudica a los microorganismos por el esfuerzo cortante del fluido sobre los microorganismos. Más aun, el mezclado debe de considerar los gases que entran, se producen y salen de los bioprocesos de forma que no afecten su operación.

## **2.2. Modelado de Procesos**

Una manera de hacer más entendible un proceso es usando un modelo matemático que pueda representar los fenómenos de reacción y transporte más importantes (Bequette, 2003; Datta y Sablani, 2006; Ramkrishna y Song, 2016). La formulación de las ecuaciones de un modelo generalmente consiste en expresar las leyes físicas o principios de conservación en símbolos apropiados. Los principios de conservación para problemas físicos son usualmente los de balances de masa, momento o energía. Al generalizar estos conceptos al caso de sistemas de flujo, se obtiene un conjunto de ecuaciones diferenciales de cambio para la transferencia de energía, masa y momento.

### **2.2.1. Modelado de bioprocesos**

Los modelos utilizados para describir los procesos biotecnológicos pueden clasificarse en cuatro grupos según el nivel de detalle y complejidad (Núñez, 2014).

**1. Modelos estructurados:** En los modelos estructurados se consideran las características internas de la célula o sus partes (metabolitos intermedios, procesos celulares, etc.).

**2. Modelos no estructurados:** La biomasa se representa con una sola variable (usualmente, la concentración total), al no considerar la estructura celular interna.

3. Modelos segregados: Un modelo segregado considera a la población de células como una colección de conjuntos de células, donde cada conjunto tiene a su vez diferentes propiedades (por ejemplo: diferente edad y/o productividad).

4. Modelo no-segregado: En estos modelos no se considera la heterogeneidad de la población celular, es decir se supone células promedio.

La Figura 2.1 representa la ubicación de las cuatro combinaciones de modelos posibles, en función de la complejidad matemática y el nivel de detalle del proceso.

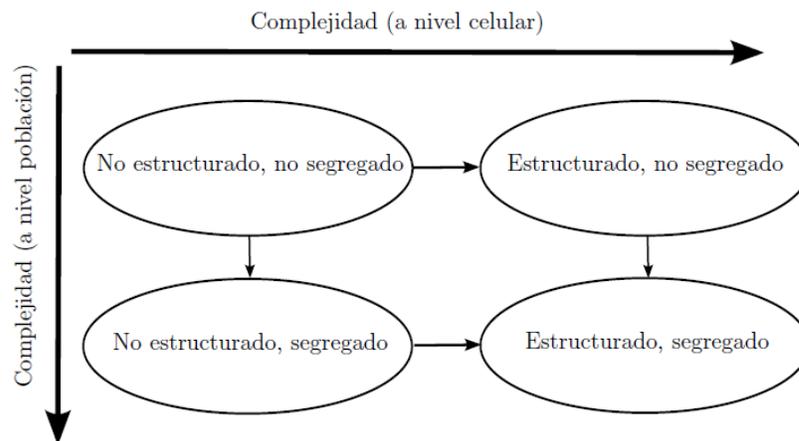
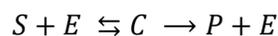


Figura 2.1. Diferentes tipos de complejidad en el modelado (tomada de Núñez 2014)

### 2.2.2. Modelado de reacciones biológicas

La ley fundamental de una reacción química es la "ley de acción de las masas". Esta ley describe la velocidad a la cual los reactantes químicos, ya sean macromoléculas grandes o simples iones, se colisionan e interaccionan para formar diferentes combinaciones químicas. Un modelo para explicar la desviación de la ley de acción de las masas para describir la cinética de reacciones biológicas se propuso por Michaels y Menten. En su esquema de reacción se considera una reacción bioquímica, donde una enzima  $E$  convierte el substrato  $S$  en el producto  $P$  a través de un proceso de dos pasos. Primero  $E$  se combina con  $S$  para formar un complejo  $C$  el cual se rompe en el producto  $P$  liberando  $E$  en el proceso. El esquema de reacción se representa por,



Al aplicar la ley de acción de las masas al mecanismo dado por la ecuación anterior, conduce a cuatro ecuaciones diferenciales,

$$\frac{dS}{dt} = k_2C - k_1SE$$

$$\begin{aligned}\frac{dE}{dt} &= (k_2 + k_3)C - k_1SE \\ \frac{dC}{dt} &= k_1SE - (k_2 + k_3)C \\ \frac{dP}{dt} &= k_3C\end{aligned}$$

se puede observar que

$$\frac{dE}{dt} + \frac{dC}{dt} = 0$$

por lo tanto,

$$\begin{aligned}\frac{d(E + C)}{dt} &= 0 \\ E + C &= cte = E_0\end{aligned}$$

Michaels y Menten supusieron que el sustrato se encuentra en equilibrio con el complejo,

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= 0 \\ k_2C &= k_1SE \\ k_2C &= k_1S(E_0 - C) \\ k_2C + k_1SC &= k_1SE_0 \\ C(k_2 + k_1S) &= k_1SE_0 \\ C &= \frac{k_1SE_0}{(k_2 + k_1S)} = \frac{SE_0}{\left(\frac{k_2}{k_1} + S\right)} = \frac{SE_0}{(k_s + S)}\end{aligned}$$

La velocidad a la cual se forma el producto está dada por,

$$\mu(s) = \frac{dP}{dt} = k_3C = \frac{k_3E_0S}{k_s + S} = \frac{\mu_{max}S}{k_s + S}$$

donde  $k_s = k_2/k_1$ , y  $\mu_{max} = k_3E_0$ .

### 2.2.3. Incertidumbre

Las incertidumbres están definidas como la falta de confianza de algún resultado o bien cuando se desconoce el tipo de resultado que se obtendrá en una determinada situación. Las incertidumbres pueden deberse a varios factores como la falta de información, los constantes cambios que se presentan sobre un tema en específico, ignorancia o incluso a fenómenos físicos. La incertidumbre es considerada un concepto abstracto, sin embargo, puede cuantificarse con las mediciones correspondientes (Zhang et al., 2018). Las

incertidumbres en un modelo se refieren a los parámetros que son inciertos en la solución de éste o la validez del modelo en determinadas regiones.

### 2.3. Observabilidad

Como se estableció en la introducción de este documento, el monitoreo instantáneo de bioprocesos es fundamental para fines de diagnóstico y control de esta clase de procesos. Sin embargo, es comúnmente impráctico o imposible medir en forma instantánea los estados representativos de un bioproceso por diversas causas, por ejemplo:

- Los sensores para medir determinados estados pueden ser muy costosos y no estar disponibles en la práctica.
- Algunas señales son imprácticas de medir.
- Existen perturbaciones no medibles o ruido de medición que afecta la medición de una variable.
- La medición no es instantánea y el tiempo de adquisición es importante.

Además, en el ámbito industrial la mayoría de las variables que se miden en forma rutinaria y practica se reduce a mediciones de  $pH$ , temperatura, flujos de líquidos y gases.

El concepto de observabilidad es útil al resolver el problema de reconstruir variables de estado no medibles a partir de variables que sí lo son en un tiempo mínimo posible. De manera informal se puede decir que la observabilidad es la característica que indica la posibilidad de que el estado (o las variables de estado) influyan en la salida. Formalmente se dice que un sistema es observable en el tiempo  $t_o$  sí, con el sistema en el estado  $x(t_o)$ , es posible determinar este estado a partir de la observación de la salida durante un intervalo de tiempo finito (Dochain, 2003).

En esta sección se presentan diferentes conceptos y métodos para establecer la propiedad de observabilidad a partir del modelo del proceso, ya sea la aproximación lineal o el modelo no-lineal.

Se debe notar que el concepto de observabilidad de interés en este proyecto de investigación doctoral es el de observabilidad completa. Es decir, la capacidad de estimar todos los estados no medibles del proceso a partir de las mediciones disponibles un modelo base. La observabilidad completa es necesaria para fines de diagnóstico del proceso al poder conocer el estado actual de las variables clave del proceso. Por otro lado, para diseños de control, tales como el MPC en sus diferentes variantes, es necesario conocer el vector de estados completo en cada instante del cálculo de la entrada de control.

Con la finalidad de claridad en la presentación, los conceptos y resultados de observabilidad que se presentan en esta sección hacen uso de notación matemática simple y sus pruebas formales se pueden consultar en las referencias correspondientes.

### 2.3.1 Observabilidad de un sistema lineal

Se considera un sistema lineal sin forzamiento (sin entrada de control) descrito por las ecuaciones:

$$\dot{x}(t) = Ax(t) \quad (2.1)$$

$$y(t) = Cx(t) \quad (2.2)$$

en donde  $\dot{x}(t)$ , son las derivadas del vector de estados  $x(t)$  de dimensión  $n$ ,  $y(t)$  es el vector de salida medible (vector de dimensión  $m$ ),  $A$  es un matiz de dimensión  $n \times n$  y  $C$  es una matriz de  $m \times n$ .

#### 2.3.1.1 Observabilidad de Kalman

Se dice que el sistema es completamente observable si el estado  $x(t_0)$  se determina a partir de la observación de  $y(t)$  durante un intervalo de tiempo finito,  $t_0 \leq t \leq t_1$ . Por tanto, el sistema es completamente observable si todas las transiciones del estado afectan eventualmente a todos los elementos del vector de salida.

El sistema (2.1) - (2.2) es completamente observable sí y sólo sí los vectores  $C$ ,  $CA$ ,  $CA^2, \dots, CA^{n-1}$ , son linealmente independientes, o en forma equivalente si la matriz de observabilidad ( $O$ ) de tamaño  $nm \times n$ :

$$O = \begin{bmatrix} C \\ CA \\ \vdots \\ CA^{n-1} \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

es de rango  $n$ , o tiene  $n$  vectores columna linealmente independientes. La matriz se denomina matriz de observabilidad. El criterio es equivalente a pedir que el determinante de  $O$  sea diferente de cero, es decir, que la matriz  $O$  sea no singular.

#### 2.3.1.2 Observabilidad por la prueba de PBH (Popov-Belevitch-Hautus)

Otra prueba de observabilidad utilizada en sistemas lineales es la prueba PBH (Chen, 1984). En este caso, para sistemas lineales invariantes en tiempo (LTI) descritos por las Ecs. (2.1) y (2.2) con conocimiento exacto de parámetros del sistema, el problema de las entradas mínimas se puede resolver eficientemente a través de la prueba de observabilidad

PBH. En la prueba de observabilidad de PBH se establece que un sistema LTI es observable si y solo si (Hangos et al., 2013),

$$\text{rang}o \begin{bmatrix} \lambda I - A \\ C \end{bmatrix} = N \quad \forall \lambda_i \in A \quad (2.4)$$

Donde  $\lambda_i$  indica el eigenvalor  $i$  de la matriz  $A$ .  $I$  es una matriz identidad de tamaño  $n$ . Como se puede notar, la prueba requiere evaluar la Ec. (2.4) para cada eigenvalor de  $A$ .

### 2.3.1.3 Observabilidad por el gramiano de observabilidad

Al utilizar la prueba de PBH, si se cumple para todos los eigenvalores de  $A$ , entonces la solución única, denominada el gramiano de observabilidad, de la siguiente ecuación (Hangos et al., 2013),

$$W_0 A + A^T W_0 + C^T C = 0 \quad (2.5)$$

es positiva definida, y puede expresarse como,

$$W_0 = \int_0^\infty \exp A^T \tau C^T C \exp A \tau d\tau \quad (2.6)$$

Se debe notar que las condiciones de observabilidad anteriores, *i.e.*, la condición de observabilidad de Kalman, la prueba PBH y el gramiano de observabilidad son equivalentes y se aplican a la versión lineal dada por el modelo en el espacio de estados, Ecs. (2.1, 2.2).

### 2.3.1.4 Forma canónica observable

La representación en variables de estado de un sistema no es única. De las diferentes formas de la representación en variables de estado, algunas formas son más convenientes que otras para algún fin específico. A estas formas particulares que ponen en evidencia características específicas del sistema o que facilitan la aplicación de algún procedimiento se les conoce como formas canónicas. Las formas canónicas se obtienen a partir de una transformación de estado o transformación de similaridad, con la elección de una nueva variable de estado de la forma:

$$z(t) = T x(t) \quad (2.7)$$

donde  $T$  es una matriz no singular. Para estados iniciales cero y entradas iguales, la respuesta de las formas canónicas y cualquier representación de variables de estado del modelo original coincide.

Para el sistema general de orden  $n$ , la forma canónica observable está dada por:

$$\dot{x}(t) = \begin{bmatrix} 0 & \dots & \dots & -\alpha_n \\ \dots & \dots & \dots & -\alpha_{n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ I_{n-1} & & & -\alpha_1 \end{bmatrix} x(t) + \begin{bmatrix} \beta_n \\ \beta_{n-1} \\ \dots \\ \beta_1 \end{bmatrix} B u(t) \quad (2.8)$$

$$y(t) = [0 \ 0 \ \dots \ 1]x(t) \quad (2.9)$$

Por ejemplo, para un sistema de tercer orden, la forma canónica observable está dada por:

$$\dot{x}(t) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\alpha_3 \\ 1 & 0 & -\alpha_2 \\ 0 & 1 & -\alpha_1 \end{bmatrix} x(t) + \begin{bmatrix} \beta_3 \\ \beta_2 \\ \beta_1 \end{bmatrix} Bu(t) \quad (2.10)$$

### 2.3.2 Observabilidad de un sistema no-lineal

Se consideran sistemas no lineales de la forma:

$$\dot{x} = f(x) \quad (2.11)$$

$$y = h(x) \quad (2.12)$$

Donde  $f(x)$ ,  $g(x)$  y  $h(x)$  son funciones suaves (*i.e.*, continuamente diferenciables), que contienen términos lineales y no-lineales.

#### 2.3.2.1 Observabilidad por Linealización Exacta

El concepto de observabilidad para sistemas no-lineales, se extendió del caso lineal utilizando conceptos de geometría diferencial (Luttmann et al., 2012). En este caso, se puede establecer la observabilidad localmente a partir de una matriz de observabilidad que se construye con las derivadas o corchetes de Lie.

Considere el sistema no-lineal dado por las Ecs. (2.11) y (2.12), se define el espacio de observación ( $\Phi$ ) de un sistema no-lineal como el espacio de funciones del sistema que contiene el plano de salida  $h(x)$  y todos sus términos derivados de Lie,

$$\Phi(x(t)) = \begin{bmatrix} h \\ \mathcal{L}_f h \\ \mathcal{L}_f^2 h \\ \dots \\ \mathcal{L}_f^{N-1} h \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

Donde la derivada de Lie de  $h(x)$  a lo largo de  $f(x)$  se define como,

$$\mathcal{L}_f h(x) = \frac{\partial h(x)}{\partial x} f(x) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial h(x)}{\partial x_i} f_i(x) = \langle dh(x), f(x) \rangle \quad (2.14)$$

El campo vectorial  $f(x)$  en cualquier punto define una dirección a lo largo de la cual se calcula la derivada de  $h(x)$ . La derivación de Lie repetida se define recursivamente como,

$$\mathcal{L}_f^k h(x) = \frac{\partial (\mathcal{L}_f^{k-1} h(x))}{\partial x} f(x) \quad (2.15)$$

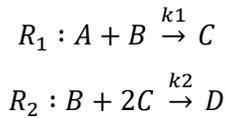
con,

$$\mathcal{L}_f^0 h(x) = h(x) \quad (2.16)$$

Una condición de observabilidad suficiente para el sistema no lineal dado por las Ecs. (2.11) y (2.12), es que la matriz dada por la Ec. (2.13) sea de una dimensión igual a la dimensión del vector de estados  $n$  (Besançon, 2013).

La matriz de observabilidad dada por la Ec. (2.13) se puede considerar una generalización para sistemas no-lineales de la matriz de observabilidad dada por la Ec. (2.3) para sistemas lineales. Debido al mayor esfuerzo computacional del cálculo de las derivadas de Lie, es más común el uso de la condición de observabilidad usando la aproximación lineal simple.

Para fines ilustrativos de la técnica se considera un sistema de reacciones químicas con cinéticas de acción de masas,



Al usar la cinética de acción de masas, y cambiando las variables  $A=x_1$ ,  $B=x_2$ ,  $C=x_3$ , y  $D=x_4$ , las ecuaciones de balance de masa se pueden escribir como:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= -k_1 x_1 x_2 \\ \dot{x}_2 &= -k_1 x_1 x_2 - k_2 x_2 x_3^2 \\ \dot{x}_3 &= k_1 x_1 x_2 - 2k_2 x_2 x_3^2 \\ \dot{x}_4 &= k_2 x_2 x_3^2 \end{aligned}$$

Asumiendo que no hay entradas externas ( $u$ ), y considerando un esquema de mediciones simples (esto es, mediciones directas de las variables de estado):

$$y(t) = (\dots, x_i(t), \dots)^T$$

Se desea demostrar que el sistema de reacciones es completamente observable si se mide la concentración del producto D, esto es  $y = x_4$ . Calculando las derivadas de Lie en función de la salida:

$$\begin{aligned} Y^{(0)} &= L_f^0 y = x_4 \\ Y^{(1)} &= L_f^1 y = k_2 x_2 x_3^2 \\ Y^{(2)} &= L_f^2 y = k_2 \dot{x}_2 x_3^2 + k_2 x_2 2x_3 \dot{x}_3 \\ &= k_2 (-k_1 x_1 x_2 - k_2 x_2 x_3^2) x_3^2 + k_2 x_2 2x_3 (k_1 x_1 x_2 - 2k_2 x_2 x_3^2) \\ Y^{(3)} &= L_f^3 y = k_2 \ddot{x}_2 x_3^2 + k_2 \dot{x}_2 2x_3 \dot{x}_3 + k_2 \dot{x}_2 2x_3 \dot{x}_3 + k_2 x_2 2\dot{x}_3^2 + k_2 x_2 2x_3 \ddot{x}_3 \end{aligned}$$

Entonces la matriz jacobiana se puede calcular como:

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial L_f^0 y}{\partial x_1} & \frac{\partial L_f^0 y}{\partial x_2} & \frac{\partial L_f^0 y}{\partial x_3} & \frac{\partial L_f^0 y}{\partial x_4} \\ \frac{\partial L_f^1 y}{\partial x_1} & \frac{\partial L_f^1 y}{\partial x_2} & \frac{\partial L_f^1 y}{\partial x_3} & \frac{\partial L_f^1 y}{\partial x_4} \\ \frac{\partial L_f^2 y}{\partial x_1} & \frac{\partial L_f^2 y}{\partial x_2} & \frac{\partial L_f^2 y}{\partial x_3} & \frac{\partial L_f^2 y}{\partial x_4} \\ \frac{\partial L_f^3 y}{\partial x_1} & \frac{\partial L_f^3 y}{\partial x_2} & \frac{\partial L_f^3 y}{\partial x_3} & \frac{\partial L_f^3 y}{\partial x_4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & J_{22} & J_{23} & 0 \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} & 0 \\ J_{41} & J_{42} & J_{43} & 0 \end{bmatrix}$$

Donde,

$$J_{22} = k_2 x_3^2$$

$$J_{23} = 2k_2 x_2 x_3$$

$$J_{31} = k_1 k_2 x_2 (2x_2 - x_3) x_3$$

$$J_{32} = -k_2 x_3 (k_1 x_1 (-4x_2 + x_3) + k_2 x_3^2 (8x_2 + x_3))$$

$$J_{33} = -2k_2 x_2 (k_1 x_1 (-x_2 + x_3) + 2k_2 x_3^2 (3x_2 + x_3))$$

$$J_{41} = k_1 k_2 x_2 (2k_2 x_3^2 (-8x_2^2 + 2x_2 x_3 + x_3^2) + k_1 (x_2 x_3 (-2x_2 + x_3) + 2x_1 (2x_2^2 - 6x_2 x_3 + x_3^2)))$$

$$J_{42} = k_2 (2k_1 k_2 x_1 x_3^2 (-24x_2^2 + 4x_2 x_3 + x_3^2) + k_2^2 x_3^4 (72x_2^2 + 32x_2 x_3 + x_3^2) + k_1^2 x_1 (2x_2 x_3 (-3x_2 + x_3) + x_1 (6x_2^2 - 12x_2 x_3 + x_3^2)))$$

$$J_{43} = 2k_2 x_2 (2k_1 k_2 x_1 x_3 (-8x_2^2 + 3x_2 x_3 + 2x_3^2) + k_2^2 x_3^3 (48x_2^2 + 40x_2 x_3 + 3x_3^2) + k_1^2 x_1 (x_1 (-3x_2 + x_3) + x_2 (-x_2 + x_3)))$$

Se puede demostrar que el cálculo de manera simbólica de  $J$  es de rango completo, por lo tanto el sistema es algebraicamente observable (Liu, 2013).

### 2.3.2.2 Observabilidad con Diagrama de Inferencia

Para resolver algunas de las limitaciones, como la linealización y el tiempo de solución algebraico que se pueden encontrar en los métodos anteriores, la observabilidad se puede estudiar además al explotar la estructura de las conexiones entre los estados, entradas y salidas del sistema (Liu et al., 2013). Este tipo de análisis se lleva a través de una representación gráfica. Un enfoque es construir un diagrama de inferencia con base a la estructura del modelo del sistema. El diagrama de inferencia es una representación de las interacciones entre variables de estado.

El diagrama de incidencia se construye teniendo en cuenta los siguientes puntos (Liu et al., 2013),

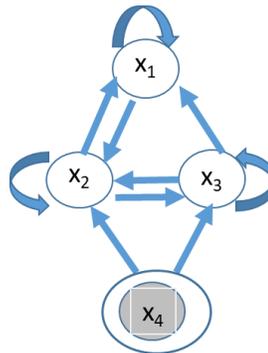
- Se traza un enlace,  $x_i \rightarrow x_j$  si  $x_j$  aparece en la ecuación diferencial de  $x_i$ . esto implica que se puede obtener información de  $x_j$  al monitorear  $x_i$  como función del tiempo.
- Se descompone el diagrama de inferencia en un conjunto único de máximos componentes conectados con firmeza (SCC). Los SCC son las subgraficas más grandes que se seleccionan tal que existe una ruta directa de cada nodo a otro nodo en la subgrafica. Los SCC se encierran con líneas punteadas. Se debe notar que cada nodo en un SCC contiene información de los otros nodos. A los SCC que no tienen enlaces de entrada se les denomina SCC raíz.
- Se selecciona al menos un nodo de cada SCC raíz, para garantizar la observabilidad de todo el sistema.

Para la construcción del diagrama de inferencia en sistemas no-lineales, el modelo no-lineal permite identificar las conexiones entre estados y salidas del sistema.

Para ilustrar las ideas del diagrama de inferencia, se considera el modelo dinámico siguiente (Liu et al., 2013),

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= -k_1 x_1 x_2 \\ \dot{x}_2 &= -k_1 x_1 x_2 - k_2 x_2 x_3^2 \\ \dot{x}_3 &= k_1 x_1 x_2 - 2k_2 x_2 x_3^2 \\ \dot{x}_4 &= k_2 x_2 x_3^2\end{aligned}$$

A partir del modelo se deriva el siguiente diagrama de inferencia,



Se puede notar que el SCC raíz es el nodo que corresponde al estado  $x_4$ , el cual solo tiene el estado  $x_4$ , por lo tanto, al seleccionar  $y = x_4$  se obtiene un sistema completamente observable.

### 2.3.2.3 Observabilidad con el Mapeo de Observabilidad

El mapeo de observabilidad es un concepto relativamente reciente para sistemas no lineales propuesto en el trabajo de Lecca y Ree (2019). El problema de observabilidad

consiste en determinar si existe relación que enlace las variables de estado  $x(t)$  las salidas  $y(t)$  y sus derivadas del tiempo  $\dot{y}(t)$  y por lo tanto definidas ellas únicamente en términos de cantidades medibles sin la necesidad de conocer las condiciones iniciales (Villaverde, 2019). Si no existe relación, los estados iniciales del sistema no pueden ser deducidos observando el comportamiento de la salida. Esto implica que aquí hay infinitamente muchos conjuntos de parámetros que producen exactamente la misma salida para diferentes valores de  $x_0$  y así los estados del modelo no se pueden estimar a partir de la medición experimental disponible (Lecca y Ree, 2019).

La prueba de observabilidad propuesta por Lecca y Ree (2019) se basa en el cálculo del mapa no-lineal,

$$Z = Q(x(t_0)) \quad (2.17)$$

donde

$$Z = \begin{bmatrix} y(t_0) \\ \dot{y}(t_0) \\ \vdots \\ y^{(n-1)}(t_0) \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

Q, de denomina el mapeo de observabilidad

$$Q(x(t_0)) = \begin{bmatrix} h_0(x(t_0), t_0) \\ h_1(x(t_0), t_0) \\ \vdots \\ h_{n-1}(x(t_0), t_0) \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

los elementos de esta matriz se obtienen de la aproximación de  $y(t)$  del sistema dado por las Ecs. (2.11) y (2.12) por una serie de Taylor,

$$y(t) = y(t_0) + \dot{y}(t_0)(t - t_0) + \frac{\ddot{y}(t_0)}{2!}(t - t_0)^2 + \dots + \frac{y^{(n-1)}(t_0)}{(n-1)!}(t - t_0)^{n-1} + \frac{y^n(t^*)}{n!}(t - t_0)^n \quad (2.20)$$

donde,

$$y(t_0) = h(x(t_0), t_0) = h_0(x(t_0), t_0) \quad (2.21)$$

$$\dot{y}(t_0) = \frac{\partial h_0}{\partial t}(x(t_0), t_0) + \left( \frac{\partial h_0}{\partial x(t_0)}(x(t_0), t_0) \right) f(x(t_0), t_0) = h_1(x(t_0), t_0) \quad (2.22)$$

:

$$y^{(n-1)}(t_0) = \frac{\partial h_{n-2}}{\partial t}(x(t_0), t_0) + \left( \frac{\partial h_{n-2}}{\partial x(t_0)}(x(t_0), t_0) \right) f(x(t_0), t_0) = h_{n-1}(x(t_0), t_0) \quad (2.23)$$

Por consideración, la matriz  $Q$  es continuamente diferenciable, y tiene una matriz Jacobiana  $J(x)$ , si existe una constante  $\varepsilon > 0$  tal que el valor absoluto de los menores principales superiores  $M_1, M_2, \dots, M_n$  de  $J(x)$  satisfacen la condición,

$$|M_1| \geq \varepsilon, \quad \frac{|M_2|}{|M_1|} \geq \varepsilon, \dots, \frac{|M_n|}{|M_{n-1}|} \geq \varepsilon$$

Para todo  $x$ , entonces el sistema no-lineal una condición suficiente para observabilidad. Además, si la matriz matriz Jacobiana  $J(x)$ , se puede expresar como el producto de dos matrices simétricas  $J_1$  y  $J_2$ ,  $Q$  es invertible si y solo si esta matrices simétricas son ambas positivas (negativas) o una de ellas es positiva definida y otra negativa definida la condición de observabilidad cumple la condición de necesidad.

Lecca y Ree (2019) presentaron la aplicación de esta propuesta de observabilidad para diferentes casos de estudio, incluyendo dos modelos simples de biorreactores. Se debe notar que la validación de los criterios en forma analítica se complica en bioprocesos por las no-linealidades y el orden de los modelos.

### 2.3.2.4 Observabilidad Estructural

En la literatura se han abordado varias generalizaciones de observabilidad para sistemas no lineales (Hermann y Krener 1977; Sontag 1991; Zhirabok y Shumsky 2012; Mesbahi et al., 2019). El trabajo de Montanari y Aguirre introduce la definición de observabilidad local conectada con geometría diferencial, establecida por Hermann y Krener (1977).

Para el sistema no-lineal (2.11)-(2.12), el sistema es localmente observable en  $x_0$  si la matriz de observabilidad,

$$O(x_0) = \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \mathcal{L}_f^0 h(x) \\ \vdots \\ \mathcal{L}_f^{s-1} h(x) \end{bmatrix}_{x=x_0} \quad (2.24)$$

es de rango completo, esto es, rango de  $(O(x_0)) = n$ . De la definición anterior, el sistema no-lineal (2.11)-(2.12) es observable si el mapa,

$$\Psi_h(x) : x \mapsto \left[ y^T [y^{(1)}]^T \dots [y^{(s-1)}]^T \right]^T \quad (2.25)$$

es invertible (inyectiva) para un  $s$  dado  $s \geq 1$ , En otras palabras, si es posible determinar únicamente  $x$  de  $y$  (y sus derivadas sucesivas).  $\Psi_h(x)$  es localmente invertible en  $x_0$  si la matriz siguiente tiene rango completo, esto es,

$$\text{rank} \left( \frac{\partial \Psi_h(x)}{\partial x} \right) \Big|_{x=x_0} = n$$

quedando el mapeo de la siguiente manera:

$$\Psi_h(x) := \begin{bmatrix} y \\ y^{(1)} \\ y^{(2)} \\ \dots \\ y^{(s-1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h(x) \\ dh(x)/dt \\ d^2h(x)/dt^2 \\ \dots \\ d^{s-1}h(x)/dt^{s-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h(x) \\ \mathcal{L}_f h(x) \\ \mathcal{L}_f^2 h(x) \\ \dots \\ \mathcal{L}_f^{s-1} h(x) \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

Donde las derivadas de Lie de alto orden se definen por la Ec. (2.15) con (2.16). La matriz  $\Psi_h(x)$  es equivalente a  $\mathcal{O}(x)$ , por eso la condición de rango implica invertibilidad local (y observabilidad) en  $x_0$ . En el contexto de mediciones simples ( $q=1$ ), la matriz de observabilidad no lineal (2.26) es de rango completo solo si  $s \geq n$ .

### 2.3.2.5 Observabilidad con base a un Gramiano Empírico

Como se presentó en la sección 2.3.1.3, la matriz gramiana se utiliza como un criterio para evaluar la observabilidad lineal. Su extensión a sistemas no-lineales se propuso al introducir una aproximación numérica denominado gramiano empírico de observabilidad (EOG, por sus siglas en ingles). La metodología del EOG se describe brevemente a continuación.

El sistema dinámico lineal de tiempo variante (LTV).

$$\begin{aligned} \dot{x} &= A(t)x + B(t)u & x(t_0) &= x_0 & (2.27) \\ y &= C(t)x + D(t)u \end{aligned}$$

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

$$\mathcal{G}_0^{lin} = \int_{t_0}^{t_e} \Phi^T(t, t_0) C^T(t) C(t) \Phi(t, t_0) dt \quad (2.28)$$

es invertible. De lo contrario, se dice que el sistema es no observable.  $\Phi(t, t_0)$  representa la matriz de transición de estado (Brammer y Siffling, 1989). En términos generales, la GM  $\mathcal{G}_0$  representa una medida basada en energía para la observabilidad, ya que caracteriza la transferencia generalizada de energía dada por,

$$E_{meas} = \int_{t_0}^{t_e} y^T(t) y(t) dt = x_0^T \mathcal{G}_0 x_0 \quad (2.29)$$

Desde el estado inicial  $x_0$  hasta las salidas medidas  $y(t)$  (Chen, 1999). Por lo tanto, la GM influye directamente en los estados que contribuyen a la energía total de la medición. Los estados que no contribuyen significativamente a la energía total son poco observables. Un inconveniente de esta matriz gramiana de observabilidad lineal es su limitación a los sistemas lineales (o al menos linealizables).

El enfoque analítico del teorema anterior ha sido extendido a sistemas no lineales (Singh y Hann, 2005). En particular, recientemente Powel y Morgansen (2015) introdujeron el enfoque EOG (gramiano empírico de observabilidad) como una herramienta para evaluar la observabilidad (local) de sistemas no lineales con control. Este concepto evita el procedimiento de linealización y se basa solo en la simulación del sistema no lineal.

El sistema no lineal con entrada de control descrito por:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= f(x, u) \quad \text{con } x(t_0) = x_0 & (2.30) \\ y &= h(x, u)\end{aligned}$$

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

$$\mathcal{G}_O = \sum_{l=1}^r \sum_{m=1}^s \frac{1}{rsc_m^2} \int_{t_0}^{t_e} T_l \Psi_{lm}(t) T_l^T dt \quad (2.31)$$

es de rango completo y por lo tanto es invertible. De lo contrario, el sistema se denota como (localmente) no-observable.

En términos generales, el EOG de la Ec. (2.31) se puede interpretar como la suma de la matriz de covarianza de salida calculada para un conjunto de diferentes condiciones iniciales (Hann et al., 2003). La razón es que los componentes  $ij$ -th de las matrices de correlación  $\Psi_{lm} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  se calculan mediante

$$\Psi_{lmi}(t) = (y_{lmi}(t) - y_N(t))^T (y_{lmj}(t) - y_N(t)) \quad (2.32)$$

donde  $y_{lmi}(t)$  es la solución de (2.30) a una condición inicial (estado perturbado),

$$x_{lmi,0} = c_m T_l e_i + x_{N,0}$$

y una trayectoria de entrada  $u_N(t)$ .  $y_N(t)$  representa la salida nominal y  $x_{N,0} = x_N(t = t_0)$  el estado inicial de la trayectoria del estado nominal. Para determinar el conjunto de estados perturbados en la ecuación anterior, se definen como sigue el conjunto  $\mathcal{T}$  de matrices de rotación unitarias, el conjunto  $\mathcal{M}$  de diferentes tamaños de perturbación (pesos) y el conjunto  $\mathcal{E}$  de los vectores base:

$$\mathcal{T} = \{T_1, \dots, T_r: T_l \in \mathbb{R}^{n \times n}, T_l^T T_l = I, \quad L = 1, \dots, r\} \quad (2.33)$$

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

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

Con estos conjuntos, una región en el espacio de estado alrededor del punto de interés (incluida la distancia y dirección de perturbación del estado) se puede determinar

adecuadamente. La definición anterior del EOG, Ec. (2.31) se reduce a la GM para sistemas lineales (Ritter et al., 2018).

## 2.4 Índice de observabilidad

La observabilidad de sistemas no-lineales se basa en la mayoría de los casos en el cálculo de la matriz de observabilidad de Kalman que es válida alrededor del punto de aproximación de la linealización del modelo no-lineal del proceso. Por otro lado, la matriz de observabilidad con base a derivadas de Lie o las metodologías que se describen para sistemas no-lineales, el resultado que se establece es que el sistema es observable o no. Con la finalidad de identificar pérdidas de la observabilidad se ha propuesto el índice de observabilidad (Nahar et al., 2019). La cuantificación del grado de observabilidad permite identificar posibles problemas en la estimación de estados bajo variaciones en las condiciones de operación del proceso que se desea estimar los estados no medibles.

### 2.4.1 Invertibilidad de matrices y valores singulares

Como se ha establecido en los diferentes criterios de observabilidad, tanto de sistemas lineales como los no-lineales, la observabilidad depende de establecer en forma única los estados a partir de la o las mediciones disponibles. Más aun, los diferentes enfoques de observabilidad conducen a condiciones que requieren que las matrices de observabilidad o de etapas intermedias sean invertibles. Esto comúnmente está asociado a que la matriz representa un sistema de ecuaciones lineales, tal que, si es invertible, el sistema tiene una solución única. Así, se podría inferir que los sistemas con poca o nula observabilidad si tales matrices se aproximan a la singularidad.

Una forma de cuantificar la invertibilidad de una matriz es a través del número de condición,

$$C = \frac{\sigma_{max}}{\sigma_{min}} \quad (2.34)$$

Un número de condición cercano a 1 está asociado a matrices que están bien acondicionadas que permite un cálculo de la inversa con buena precisión y que no es muy sensible a cambios en las entradas. Valores altos del número de condición por otro lado están asociados a matrices mal condicionadas que pueden generar errores importantes en el cálculo de la inversa.

Se debe notar que el número de condición se define en términos de los valores singulares máximos  $\sigma_{max}$  y mínimos  $\sigma_{min}$  de la matriz de observabilidad  $O$ . Para obtener los valores singulares de la matriz de observabilidad se tiene,

$$O = USV^T \quad (2.35)$$

Donde la diagonal de la matriz rectangular  $S \in mn \times n$  contiene  $n$  valores singulares  $\sigma_i$  y  $U \in mn \times mn$  y  $V \in n \times n$  son matrices unitarias. Así, los valores singulares y el número de condición son parámetros que permiten cuantificar el grado de invertibilidad de una matriz.

### 2.4.2 Índice de observabilidad

El cálculo de la condición de rango de Kalman puede producir una medición no efectiva de la relativa cercanía a la singularidad de la matriz de observabilidad, esto es demostrado en (Friedland, 1975). Para proveer una información más robusta de la observabilidad del sistema, Whalen et al. (2015), introducen el cálculo de un índice de observabilidad con base a los valores singulares como sigue:

$$\delta(x) = \frac{|\sigma_{min}[O^T O]|}{|\sigma_{max}[O^T O]|} \quad (2.36)$$

Donde  $0 \leq \delta(x) \leq 1$ .  $\delta(x) = 1$  indica observabilidad completa y  $\delta(x) = 0$  indica no observabilidad.

### 2.4.2 Grado de observabilidad

Otra propuesta complementaría para medir el grado de observabilidad de un sistema se basa en la carencia de co-linealidad de las filas de la matriz de observabilidad  $O(k)$  (Fredric Marvin, 1980; Ham y Brown, 1983). Donde  $O(k)$  se refiere a la variación de la matriz de observabilidad en  $k$  instantes de muestreo del tiempo para estudiar su variación dinámica.

Con base a la observación de la co-linealidad, el grado de observabilidad se puede cuantificar investigando la relación espacial a través de todas las filas de la matriz de observabilidad. Dado que en los ángulos entre las vectores filas de  $O(k)$  es importante analizar la dependencia lineal, estos vectores son normalizados (Nahar et al., 2019).

La matriz de observabilidad normalizada en el tiempo  $k$ , se denota como  $\mathcal{N}$  y las filas de la matriz de observabilidad  $O(k)$  se denotan como  $O^j(k)$  donde  $j = 1, 2, \dots, mN$  son las filas. El elemento normalizado en la  $j$ -th fila y la  $i$ -th columna en la matriz  $\mathcal{N}$  es dado por:

$$\mathcal{N}_i^j = \frac{o_i^j}{\sqrt{(\sum_{i=1}^N |o_i^j|^2)}} \quad (2.37)$$

Donde  $i=1, 2, \dots, N$  denota los elementos dentro de cada fila.

Pequeños eigenvalores de  $\mathcal{N}^T \mathcal{N}$  indican el grado (carencia o debilidad) de observabilidad de un sistema y los correspondientes eigenvectores se refieren a la dirección de debilidad de la observabilidad (Fredric Marvin, 1980). Esto es,

$$deg \mathcal{N} = \lambda_{min} \quad (2.38)$$

Donde  $deg \mathcal{N}$  es el grado de observabilidad y  $\lambda_{min}$  es el mínimo entre todos los eigenvalores  $\lambda_i$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ).

Si se denota el eigenvector correspondiente a  $\lambda_{min}$  como  $V_{min}$ , entonces  $V_{min}$  es la dirección de la debilidad de observabilidad. La observabilidad de un sistema es alta cuando todos los eigenvalores son iguales o cercanos a los demás. De otra manera, el sistema es no-observable cuando uno o más de los eigenvalores es igual a cero.

La medición relativa de observabilidad del sistema es dada por la razón de eigenvalores:

$$\mathcal{R} = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}} \quad (2.39)$$

Donde  $\lambda_{max}$  es el máximo eigenvalor de  $\mathcal{N}^T \mathcal{N}$ . El sistema con una relación de eigenvalores cercanos a uno se considera altamente observable (Nahar et al., 2019).

## 2.5. Estimadores de estados

Para un sistema que es observable es posible reconstruir o estimar los estados a través de un observador o estimador de estados. Un observador es un sistema dinámico, que tiene como elementos de entrada la salida del sistema  $y(t)$  y la entrada de control  $u(t)$  y genera como salida un estimado de los estados no medibles, denotados como  $x(t)$ .

Existen muchos estimadores de estados que se han propuesto en la literatura, los cuales varían en su diseño, complejidad y desempeño para la estimación de estados. En esta sección se presentan las bases de diseño de los observadores de estado de mayor uso y aplicación en procesos químicos y bioprocesos.

### 2.5.1. Filtro de Kalman

El filtro de Kalman se desarrolló por Rudolf E. Kalman en 1960, y sirve para poder identificar los estados no medibles de un sistema dinámico lineal cuando el sistema está sometido a ruido blanco aditivo.

El filtro de Kalman estima los estados de un proceso al usar un tipo de retroalimentación. El filtro estima el estado del proceso en algún tiempo y entonces se obtiene una retroalimentación en forma de una medición con ruido. Como tal, las ecuaciones para el filtro de Kalman se dividen en dos grupos: Las ecuaciones de actualización en el tiempo, y las ecuaciones de actualización de mediciones. Las ecuaciones de actualización en el tiempo generan una proyección (en el tiempo) del estado actual y un estimado del error de las covarianzas para obtener un estimado a priori para el siguiente paso de tiempo. Las ecuaciones de actualización de mediciones incorporan una nueva medición en el estimado a priori para obtener un estimado a posteriori mejorado. Las ecuaciones de actualización en el tiempo se pueden considerar como la parte predictora del algoritmo. Las ecuaciones de actualización de mediciones se pueden considerar como la parte correctora del algoritmo.

Un algoritmo del método se muestra en la figura siguiente:

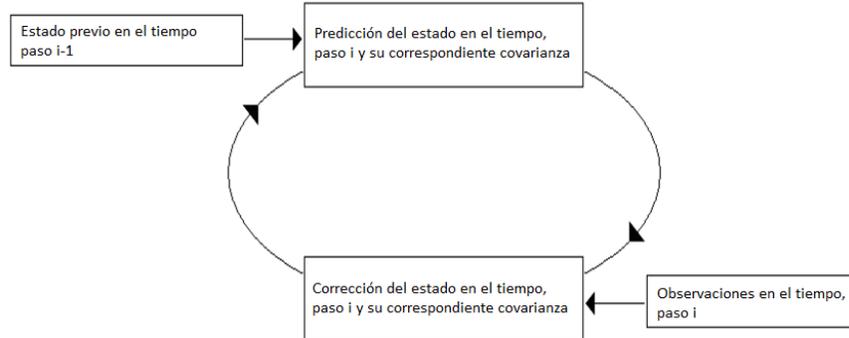


Figura 2.2. Algoritmo de Kalman

Las ecuaciones del filtro de Kalman en forma estándar consisten en la predicción y en la corrección como sigue:

Ecuaciones de predicción:

$$\hat{X}_{k|k-1} = F_k \hat{X}_{k-1|k-1} + B_k U_k \quad (2.40)$$

$$P_{k|k-1} = F_k P_{k-1|k-1} F_k + Q_k \quad (2.41)$$

Ecuaciones de corrección:

$$\hat{X}_{k|k} = \hat{X}_{k|k-1} + K_k (Z_k - H_k \hat{X}_{k|k-1}) \quad (2.42)$$

$$P_{k|k} = (I - K_k H_k) P_{k|k-1} \quad (2.43)$$

Con la ganancia definida como:

$$K_k = P_{k|k-1} H_k^T S_k^{-1} \quad (2.44)$$

Donde la notación es la siguiente:

- $\hat{X}_{k|k-1}$  se refiere a la predicción de la variable o vector de estados  $X$  en el instante  $k$ , utilizando las variables observadas en el instante  $k-1$ .
- $P_{k|k-1}$  se refiere a la predicción de las varianzas-covarianzas  $P$  en el instante  $k$ , utilizando las variables observadas en el instante  $k-1$ .
- $F$  es la matriz de transición.
- $U_k$  es un control basado en la información anterior, es decir,  $U_k = h(Z_1, Z_2, \dots, Z_{k-1})$ .
- $Z_k$  esta dada por la ecuación de observación,

$$Z_k = H_k X_k + V_k$$

- $H_k$  es una matriz que relaciona la observación y el vector de estados sin tener en cuenta el ruido de medición, que está definido en  $V_k$ .
- $P_{k|j}$  es la matriz de varianzas-covarianzas del error,

$$P_{k|j} = E \left[ (X_k - \hat{X}_{k|j})(X_k - \hat{X}_{k|j})^T \right]$$

- $H_k$  es una matriz que relaciona la observación y e

En términos simples,  $\hat{X}_{k|k}$  es el valor esperado del estado  $X$  en el tiempo  $k$ , condicionado por las mediciones tomadas hasta el tiempo  $j$ . La ganancia  $K$  de realimentación del error en el filtro de Kalman se puede seleccionar de forma óptima cuando se conocen las varianzas de los ruidos que afectan al sistema.

El filtro de Kalman proporciona una buena solución al problema de estimación de estados en procesos sujetos a ruidos de medición blancos y no correlacionados. Además, estados iniciales deben comenzar cerca a los reales porque las ganancias se obtienen con base en un modelo lineal.

### 2.5.2. Observador de Luenberger

Se considera un sistema de la forma,

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= Ax(t) + Bu(t) \\ y(t) &= Cx(t) \end{aligned} \quad (2.45)$$

si el sistema satisface la condición de rango de observabilidad, entonces, existe un observador de la forma (Hangos et al., 2006),

$$\dot{\hat{x}}(t) = A\hat{x}(t) + Bu(t) + K(C\hat{x}(t) - y(t)) \quad (2.46)$$

donde  $\tilde{x}(t)$  es un estimado del estado  $x(t)$  del sistema y  $K$  es una matriz tal que  $A-KC$  es estable.

Se puede ver que el observador es una copia del sistema en términos del estado estimado  $x(t)$  más una corrección dada por un gradiente  $K(C\tilde{x}(t) - y(t))$ . Se puede realizar un análisis sencillo para demostrar las capacidades de estimación del observador dado por la Ec. (2.46) en un proceso representado por la Ec. (2.45). Al restar la dinámica del sistema original y la dinámica del observador propuesto, se obtiene:

$$\dot{x}(t) - \dot{\tilde{x}}(t) = A(x(t) - \tilde{x}(t) - K(y(t) - C\tilde{x}(t))) \quad (2.47)$$

como  $y(t) = Cx(t)$  se tiene,

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) - \dot{\tilde{x}}(t) &= A(x(t) - \tilde{x}(t) - K(Cx(t) - C\tilde{x}(t))) \\ &= A(x(t) - \tilde{x}(t) - KC(x(t) - \tilde{x}(t))) \end{aligned} \quad (2.48)$$

que se puede escribir como:

$$\dot{x}(t) - \dot{\tilde{x}}(t) = (A - KC)(x(t) - \tilde{x}(t)) \quad (2.49)$$

si se define el error de estimación:

$$e_e(t) = x(t) - \tilde{x}(t) \quad (2.50)$$

La Ec. (2.49) se puede escribir de la forma:

$$\dot{e}(t) = (A - KC)e(t)$$

de modo que con una elección adecuada de la matriz de observación  $K$  es posible que todos los valores propios de  $A-KC$  tengan parte real negativa y, por lo tanto:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e_e(t) = 0 \quad (2.51)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (x(t) - \tilde{x}(t)) = 0$$

y se puede asegurar una convergencia asintótica, tal que:  $x(t) \rightarrow \tilde{x}(t)$  conforme  $t \rightarrow \infty$ . Es decir,  $x(t) - \tilde{x}(t) \rightarrow 0$  conforme  $t \rightarrow \infty$ .

Si se considera un sistema dinámico lineal afectado por ruido blanco en los estados y en la medición, como en el filtro de Kalman, se tienen los siguientes resultados. Para sistemas observables completamente uniformes, donde  $V$  es la matriz de covarianza del ruido blanco de los estados y  $W$  es la matriz de covarianza del ruido blanco de medición, la matriz  $K(t)$  está dada por,

$$\frac{dM(t)}{dt} = A(t)M(t) + M(t)A^T(t) - M(t)C^T(t)W^{-1}C(t)M(t) + V + \delta M(t) \quad (2.52)$$

$$M(0) = M_0 = M_0^T > 0,$$

$$W = W^T > 0$$

$$K(t) = M(t)C^T(t)W^{-1}$$

con cualquiera de las siguientes condiciones,

$$\delta > 2\|A(t)\|, \text{ para todo } t$$

$$V = V^T > 0$$

La velocidad de convergencia se puede sintonizar por  $\delta$  o  $V$ .

- Para  $\delta=0$ , se obtiene el observador clásico de Kalman, con la condición relacionada usual para la convergencia que  $(A, V)$  sean controlables completamente uniformes.
- Para  $\delta=0$ , el observador es óptimo en el sentido de minimización con respecto a  $z$ ,

$$\int_0^t [(C(\tau)z(\tau) - y(\tau))^T W^{-1} (C(\tau)z(\tau) - y(\tau)) + v^T(\tau) V^{-1} v(\tau)] d\tau + (z_0 - \hat{x}_0)^T M_0^{-1} (z_0 - \hat{x}_0)$$

bajo,

$$\begin{aligned} \frac{dz(t)}{dt} &= A(t)z(t) + v(t) \\ y(t) &= C(t)z(t) \end{aligned} \quad (2.53)$$

Además, es óptimo en el sentido de minimizar la media del error de estimación al cuadrado para un sistema afectado por ruidos blancos de los estados y de medición, sin correlacionarse, con  $V$  y  $W$ , las matrices de varianzas respectivas.

La ganancia del observador además se puede calcular como,

$$K(t) = S^{-1}(t)C^T W^{-1} \quad (2.54)$$

donde  $S$  es la solución de:

$$\begin{aligned} \frac{dS(t)}{dt} &= -A^T(t)S(t) - S(t)A(t) + C^T W^{-1} C(t) - \delta S(t) - S(t)VS(t) \\ S(0) &= S^T(0) > 0 \end{aligned} \quad (2.55)$$

Cuando  $V$  es cero se tiene una ecuación lineal  $S$ .

### 2.5.3. Filtro Extendido de Kalman

Dado un sistema no-lineal de la forma,

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= f(x(t), u(t)) \\ y(t) &= hx(t) \end{aligned} \quad (2.56)$$

el filtro extendido de Kalman está dado por,

$$\dot{\tilde{x}}(t) = f(x(t), u(t)) - K(t)(h(\tilde{x}(t)) - y(t)) \quad (2.57)$$

donde  $K(t)$  está dada como en el observador de Kalman con,

$$A(t) = \frac{\partial f}{\partial x}(\tilde{x}(t), u(t)) \quad (2.58)$$

$$C(t) = \frac{\partial h}{\partial x}(\tilde{x}(t)) \quad (2.59)$$

esto conduce a un diseño de observador sistemático en para un sistema no-lineal, sin embargo, en general, la convergencia no se garantiza. Algunas desventajas para su aplicación son: (i) Utiliza un modelo lineal en un punto de operación. (ii) Se basa en una estructura perfecta del modelo. (iii) Puede tener error en la estimación. (iv) Requiere resolver la ecuación de Riccati.

#### 2.5.4. Observador de Alta Ganancia

Considere un sistema no-lineal de la forma,

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= Ax(t) + \phi(Cx(t), u(t)) \\ y(t) &= Cx(t) \end{aligned} \quad (2.60)$$

donde  $\phi(Cx(t), u(t))$  es una no-linealidad del modelo. Si  $(A, C)$  es observable, el sistema admite un observador de la forma,

$$\dot{\tilde{x}}(t) = A\tilde{x}(t) + \phi(y, u(t)) - K(t)(C\tilde{x}(t) - y(t)) \quad (2.61)$$

con  $K$  tal que  $A-KC$  es estable.

Si se considera ahora un sistema no-lineal de la forma,

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= A_0x(t) + \phi(x(t), u(t)) \\ y(t) &= C_0x(t) \end{aligned}$$

con,

$$A_0 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad C = [1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]$$

si la no-linealidad  $\phi(x(t), u(t))$  es globalmente Lipschitz con respecto a  $x(t)$ , uniformemente con respecto a  $u(t)$  y tal que,

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial x_j}(x, u) = 0, \text{ para } j \geq i + 1, \quad 1 \leq i, j \leq n \quad (2.62)$$

el sistema admite un observador de la forma,

$$\dot{\tilde{x}}(t) = A_0\tilde{x}(t) + \phi(\tilde{x}(t), u(t)) - \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda^n \end{bmatrix} K_0(C_0\tilde{x}(t) - y(t)) \quad (2.63)$$

con  $K_0$  tal que  $A_0 - K_0 C_0$  es estable y  $\lambda$  suficientemente grande.

El diseño anterior se conoce como observador de alta ganancia debido a que subyace en la elección del parámetro de sintonizado  $\lambda$  suficientemente grande, de modo que la

dinámica lineal del error de observación domina sobre la parte no-lineal. La convergencia es más rápida para valores más grandes de  $\lambda$ .

El diseño de alta ganancia se puede extender para sistemas de la siguiente forma,

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= f(x(t), u(t)) \quad (2.65) \\ y(t) &= C_0 x(t)\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x, u) &= 0, \text{ para } j \geq i + 1 \quad (2.66) \\ \frac{\partial f_i}{\partial x_{j+1}}(x, u) &\geq \alpha_i > 0, \text{ para } x(t), u(t)\end{aligned}$$

Los observadores de alta ganancia tienen la característica que valores altos de la ganancia conducen a menor error en la estimación. Sin embargo, tales valores altos pueden generar oscilaciones en la estimación inicial y hacerlo más susceptible a ruido de medición. Más aun, no es posible en muchas aplicaciones llevar el modelo lineal a la forma canónica necesaria.

### 2.5.5. Observador de Modo Deslizante

Los diseños de observadores de modo deslizante (SMO, por sus siglas en inglés), han ganado una popularidad en aplicaciones en la ingeniería de procesos. En los SMO se utiliza una acción discontinua para forzar las trayectorias de los estados a converger a la denominada superficie deslizante, en la cual se garantiza la convergencia del error de estimación a cero. En la literatura se han propuesto SMO de diferentes grados. En los SMO de primer orden, la acción discontinua aparece en la primera derivada del tiempo de la superficie deslizante. En los SMO de segundo orden, la señal discontinua aparece en la segunda derivada de la superficie deslizante. El SMO denominado *super-twisting* es un SMO de segundo orden que ha probado muy buenas propiedades de estimación con convergencia en tiempo finito.

Si se considera ahora un sistema no-lineal dado por la Ec. (2.65), el siguiente sistema dinámico,

$$\begin{aligned}\dot{\hat{x}}(t) &= f(\hat{x}(t), u(t)) - K \text{sign}(y(t) - \hat{y}(t)) \|y(t) - \hat{y}(t)\|^{1/p} \quad (2.67) \\ \hat{y}(t) &= C_0 \hat{x}(t)\end{aligned}$$

es un observador de modo deslizante de alto orden. Donde  $K$  es la ganancia del observador, y  $p > 1$  es un número impar.

Los SMO han demostrado un buen desempeño y rápida convergencia para la estimación de estados en muchas aplicaciones. La asignación del vector  $K$ , a pesar de que existen diversos criterios para establecer cotas, se hace comúnmente por prueba y error.

## Capítulo 3

### Casos de Estudio

En este Capítulo se describen las características de los casos de estudio. Se incluye el modelado de cada caso de estudio, simulaciones numéricas bajo diferentes escenarios, y la linealización en algunos de ellos con las condiciones de simulación. Los casos de estudios seleccionados corresponden a: (i) Un modelo de referencia o *benchmark* para estudios de estimación y control de la producción biológica de Hidrogeno. (ii) Un modelo de producción de biogás por medio de digestión anaerobia con validación experimental. (iii) Un modelo de referencia de crecimiento de microalgas. (iv) Un modelo de producción de biodiesel a partir de grasas atrapadas.

### 3.1 Producción de hidrógeno por fotofermentación en un CSTR

#### 3.1.1. Descripción del proceso

La producción de hidrógeno ( $H_2$ ) es atractiva debido a que durante su combustión se produce en su mayoría agua y presenta un alto rendimiento energético. Así, el  $H_2$  se considera uno de los combustibles más prometedores de nueva generación (Demirbas, 2008). Los estudios de producción de  $H_2$  están dirigidos actualmente a reducir costos de equipos y operación, y en mejorar la eficiencia de las diversas tecnológicas que existen (Bastidas-Oyanedel et al., 2015; Arimi et al., 2015).

Los procesos biológicos han demostrado potencial para la producción sostenible de hidrógeno. El hidrógeno puede ser producido por microorganismos utilizando materias primas renovables como los desechos orgánicos. Los procesos de fermentación oscura y foto-fermentación son los métodos de producción de bio- $H_2$  más estudiados y factibles (Nandi and Sengupta, 1998). En la foto-fermentación organismos heterótrofos en presencia de luz (bacterias fotosintéticas) utilizan ácidos orgánicos como sustratos para la producción de bio  $H_2$ . Fermentación oscura: Los organismos heterótrofos en ausencia de luz (bacterias fermentativas) utilizan sustratos orgánicos para la producción de bio  $H_2$ . El sustrato suele ser carbohidratos que pueden proporcionar carbono y fuentes de energía para el crecimiento de bacterias productoras de  $H_2$ .

Tanto la fermentación oscura como la foto-fermentación se han llevado a cabo en modo de operación por lotes y continua (Kalinci et al., 2009; Bastidas-Oyanedel et al., 2015; Arimi et al., 2015). Los principales factores que afectan la producción y calidad del  $H_2$  son el pH, la temperatura, el tiempo de retención hidráulica, las características del sustrato y las condiciones ambientales. Varios estudios han analizado el efecto de tales factores. (Chong et al., 2009; Mohammadi et al., 2011; Ghimire et al., 2015; Silva-Ilanes et al., 2017). Los resultados de esos estudios han demostrado que el funcionamiento convencional de los reactores biológicos está sujeto a perturbaciones internas y externas significativas. Por lo tanto, la producción del  $bioH_2$  a través de los procesos de fermentación anteriores requiere de un monitoreo adecuado para detectar problemas operacionales, así como para la introducción de esquemas de control para mantener la operación del proceso en una condición óptima dada (López-Hidalgo et al., 2018; Nath y Das, 2011; Jiménez et al., 2015).

### **3.1.2 Foto-fermentación para producción de $H_2$ en un CSTR**

La foto-fermentación es la conversión fermentativa del sustrato orgánico a  $bioH_2$  a través de un grupo diverso de bacterias fotosintéticas mediante una serie de bioquímicos. Las bacterias fotosintéticas púrpuras no sulfurosas (PNSB) (por ejemplo, *Rhodobacter capsulatus*, *R. sphaeroides-RV*, *Rhodobacter sulfidophilus*) son las principales bacterias fotosintéticas, las cuales utilizan ácidos orgánicos como fuente de carbono mientras que la luz se suministra como fuente de energía (Hillmer y Gest, 1977; Manish y Banerjee, 2008). El proceso de foto-fermentación requiere un control riguroso, incluida la penetración de la luz, el pH, la temperatura, la concentración de sustrato y la densidad celular. Además, la mezcla adecuada es esencial para exponer las células brevemente a la luz, así como para evitar sedimentaciones y gradientes de nutrientes.

El primer caso de estudio considera un CSTR biológico hecho de un material transparente, que contiene la PNSB *Rhodobacter capsulatus* ( $X$ ) (Perez et al., 2015). La fuente de luz para las bacterias se proporciona a través de lámparas externas que rodean el CSTR. Una corriente de entrada con un flujo volumétrico ( $Q$ ) contiene el sustrato orgánico de entrada ( $S_{in}$ ). La corriente de salida comprende el sustrato no degradado ( $S$ ), las bacterias no activas o desprendidas ( $X$ ) y el  $bioH_2$  producida. Se considera un volumen de mezcla reactante constante, una temperatura de operación también constante, y una intensidad de luz constante.

En la Figura 3.1 se muestra una representación esquemática del proceso.

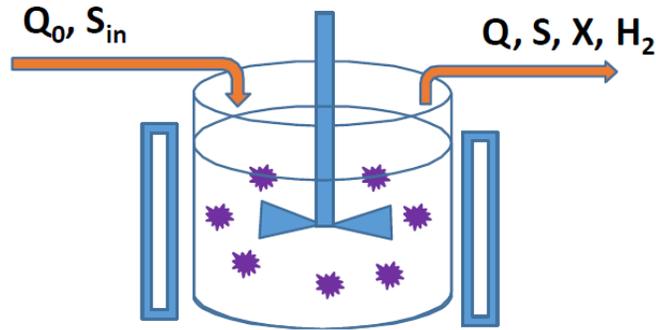


Figura 3.1. Diagrama del fotofermentador

### 3.1.3. Modelo Matemático

El modelo matemático se toma de la literatura y toma en cuenta las siguientes consideraciones:

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

Realizando el balance de materia para el sustrato,

$$\frac{dS}{dt} = D(S_{in} - S) - \frac{1}{Y_{x/s}} \frac{\mu_{max} S}{K_s + S} X \quad (3.1)$$

Representado por la acumulación de este seguido de la entrada menos la salida del mismo menos el término de consumo. Donde  $S$  (g/L) representa el sustrato,  $S_{in}$  (g/L) sustrato de entrada,  $D$  (1/h) es la velocidad de dilución,  $Y_{x/s}$  (gx/gs) el coeficiente de productividad sustrato a biomasa,  $\mu_{max}$  (1/h) constante de crecimiento máximo,  $K_s$  (g/L) constante de saturación y  $X$  (g/L) los microorganismos.

Para el segundo balance se tiene,

$$\frac{dX}{dt} = -DX + \frac{\mu_{max} S}{K_s + S} X \quad (3.2)$$

que considera la acumulación de biomasa, la salida de la misma, y su crecimiento por el consumo de sustrato.

Finalmente, el balance de masa sobre el bioH<sub>2</sub> es,

$$\frac{dH_2}{dt} = -DH_2 + \frac{1}{Y_{x/H_2}} \phi(I) \frac{\mu_{max} S}{K_S + S} X + \delta X \quad (3.3)$$

que considera su acumulación, la salida, y los dos términos de producción relacionado con la producción influenciada por la intensidad luminosa y el consumo de sustrato, así como una cantidad proporcional a la cantidad de biomasa presente en el reactor. En el modelo  $Y_{x/H_2}$  (gX/ mL\*L) es el coeficiente productividad de hidrógeno por el consumo de biomasa,  $\phi(I)$  es la intensidad luminosa y  $\delta$  (mL\*L/gX\*h) es la constante de producción de H<sub>2</sub> asociada a la concentración de biomasa, X.

### 3.1.4. Simulaciones Numéricas

El sistema para resolver consiste en tres ecuaciones diferenciales ordinarias no-lineales. Para llevar a cabo las simulaciones numéricas, se programó en Matlab el modelo de la sección anterior. La rutina que se utiliza es Runge-Kutta, que permite la solución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias no-lineales y permite un error numérico pequeño comparado con el método de Euler.

Para las simulaciones numéricas base se usaron los parámetros reportados en Pérez et al., (2015):

Condiciones Iniciales	Parámetros
$X_{(0)} = 0.13$	$\rho_m = 0.526 \text{ mgN/mgC}^*d$
$S_{(0)} = 4.19$	$K_s = 10 \text{ g/L}$
$H_{2(0)} = 0$	$Y_{x/S} = 0.7 \text{ gX/gS}$
	$Y_{x/H_2} = 1 \text{ gX/gH}_2$
	$\gamma = \phi(I)/Y_{x/H_2} = 5$
	$S_{in} = 10 \text{ g/L}$
	$D = 0.035 \text{ 1/h}$

La Figura 3.2 presenta los perfiles de los tres estados del modelo y una variación en ellos en las condiciones iniciales, esto con el objetivo de comparar las trayectorias en tres escenarios diferentes: (i) Simulación con parámetros base (línea roja). (ii) Simulación con

un incremento de la dilución del 20 % (línea verde). (iii) Simulación con un incremento de la carga orgánica del 20 % (línea azul).

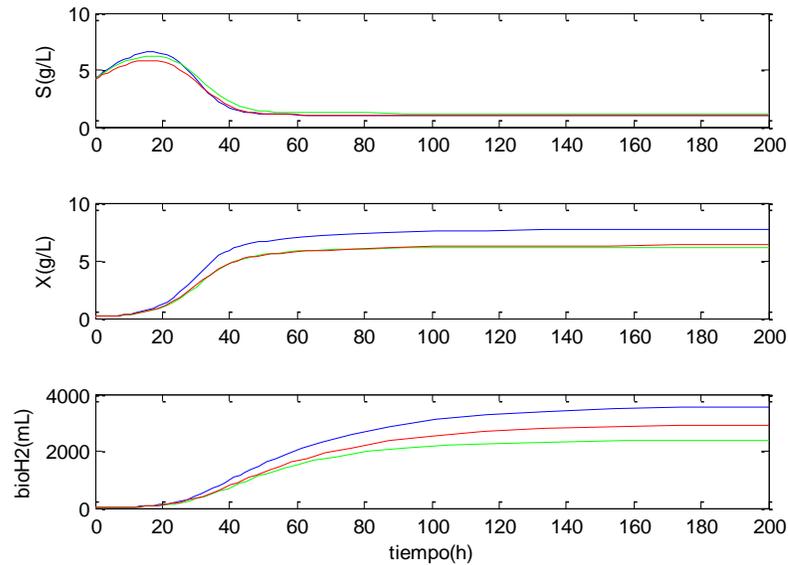


Figura 3.2. Simulación dinámica del fotofermentador

Se puede observar en la figura que la simulación base conduce a una operación en estado estacionario de alrededor de 2900 mL de bioH<sub>2</sub> en fase gas. Al incrementar la dilución se observa una disminución en la producción de bioH<sub>2</sub> asociado a un menor tiempo para su producción a partir de la biomasa. Por otro lado, al incrementar la carga orgánica, se observa un incremento en la biomasa y en el bioH<sub>2</sub>, debido a la mayor disponibilidad de alimento y una mayor concentración de biomasa.

Con la finalidad de evaluar la presencia de diferentes puntos de operación, se llevaron a cabo simulaciones con variación en condiciones iniciales: (i)  $[S_0, X_0, P_0] = [4.19 \ 0.13 \ 0]$  línea roja. (ii)  $[S_0, X_0, P_0] = [10 \ 5 \ 1000]$  línea verde. (iii)  $[S_0, X_0, P_0] = [2 \ 7 \ 2000]$  línea azul.

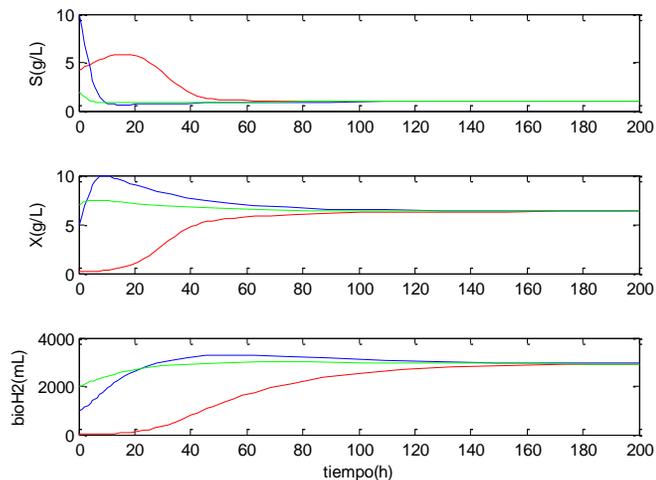


Figura 3.3. Trayectorias de los estados respecto a las variaciones propuestas.

Se puede observar que las trayectorias de los estados convergen a un solo punto de operación.

### 3.1.5 Linealización

Para proceder a realizar un análisis lineal del modelo, primero se calculan los puntos de equilibrio con los valores de operación ya establecidos, estos puntos de equilibrio se tomarán para hacer el análisis lineal. Las ecuaciones asociadas a los puntos de equilibrio son:

$$0 = D(S_{in} - S) - \frac{1}{Y_x} \frac{\mu_{MAX} S}{K_s + S} X$$

$$0 = D(S_{in} - S) - \frac{1}{Y_x} \frac{\mu_{MAX} S}{K_s + S} X$$

$$0 = -DH_2 + \frac{1}{Y_x} \varphi(I) \frac{\mu_{MAX} S}{K_s + S} X + \delta X$$

La solución de este sistema de lleva a cabo por búsqueda de raíces utilizando la función *fso/ve*. Los resultados son los que se muestran en la siguiente Tabla.

Estado	PE <sub>1</sub>	PE <sub>2</sub>
S*	10	0.9589
X*	0	6.3287
Bio-H <sub>2</sub> *	0	2924.8
Interpretación	Condición de lavado.	Factible operativamente. Numérico

Tabla 1 Puntos de equilibrio del foto-fermentador.

Para analizar la estabilidad de los puntos de equilibrio factibles, P1 y P2, se lleva a cabo la linealización del modelo no-lineal original y se evalúan los valores propios de cada punto de equilibrio. El modelo lineal resultante es el siguiente,

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial S} & \frac{\partial f_1}{\partial X} & \frac{\partial f_1}{\partial H_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial S} & \frac{\partial f_2}{\partial X} & \frac{\partial f_2}{\partial H_2} \\ \frac{\partial f_3}{\partial S} & \frac{\partial f_3}{\partial X} & \frac{\partial f_3}{\partial H_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{4SX}{7(S+10)^2} - \frac{4X}{7(S+10)} - 0.035, & -\frac{4S}{7(S+10)}, & 0 \\ \frac{2X}{5(S+10)} - \frac{2SX}{5(S+10)^2} & \frac{2S}{5(S+10)} - 0.035 & 0 \\ \frac{2X}{S+10} - \frac{2SX}{(S+10)^2} & \frac{2S}{S+10} + 16 & -0.035 \end{bmatrix}$$

Al evaluar los puntos de equilibrio, los valores propios resultantes son los siguientes:

P.E.	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\lambda_3$	Resultado
1	-0.0350	0.1650	-0.0350	Inestable
<b>2</b>	<b>-0.0350</b>	<b>-0.0350</b>	<b>-0.3011</b>	<b>Estable</b>

Tabla 2 Valores propios obtenidos a partir de los puntos de equilibrio

Es decir, el punto de operación 2, que corresponde a las simulaciones numéricas es estable, y el punto de operación 1, que corresponde a la condición de lavado, es inestable o bien no se converge a este para los parámetros de operación que se usan.

## 3.2. Digestión Anaerobia de Lactosueros

### 3.2.1. Descripción del proceso

El lactosuero es un residuo generado en la producción de queso, que se caracteriza por su alta carga orgánica (Prazeres et al., 2012). Para su tratamiento y valoración se han propuesto diferentes tratamientos biológicos y fisicoquímicos para la recuperación de compuestos con valor añadido como proteínas y lactosa. Sin embargo, un número significativo de pequeñas y medianas industrias no cuentan con los recursos económicos necesarios para la implementación de tecnologías para el tratamiento del suero de leche, lo que conduce a la eliminación inadecuada de los residuos, causando graves problemas de contaminación ambiental (Imeni et al., 2019).

La digestión anaerobia (AD) se ha propuesto como una alternativa para la valorización de este efluente, ya que además de permitir la reducción de la carga orgánica, se pueden generar subproductos de valor agregado como los AGVs, que son precursores de productos de valor agregado como biogás rico en metano, biohidrógeno y biopolímeros (Appels et al. 2008). La AD es un proceso biológico que ha retomado mucha relevancia actualmente debido a su capacidad de degradación de altas cargas orgánicas y la producción simultánea de un biogás (mezcla de  $\text{CO}_2$  y  $\text{CH}_4$ ) con alto contenido energético (Dochain, 2013; Maillereta, et al., 2015). La AD se lleva a cabo a través de cuatro etapas principales: hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis a través de un consorcio microbiano de varias especies.

La selección y el diseño de un AD dependen de varios factores, como las cargas orgánicas, la cinética biológica y las condiciones ambientales (Jimenez et al., 2015). Además, debido a la variación continua de la cantidad y composición de la carga orgánica

a tratar, la operación de AD no es una tarea simple (Larroche et al., 2016). Además, los factores internos y externos, así como las interacciones complejas y sinérgicas entre diferentes grupos de microorganismos conducen a cambios en el consorcio microbiano (Prazeres et al., 2012).

La digestión anaeróbica es intrínsecamente un proceso muy inestable y las variaciones de las variables de entrada pueden conducir fácilmente a la condición de lavado. En este caso la acumulación de AGV en el reactor inhibe el crecimiento de las bacterias metanogénicas. Así, es esencial implementar sistemas de monitoreo para detectar problemas operacionales y mantener el proceso funcionando en condiciones estables, i.e. evitando condiciones de acidificación e inhibición.

### **3.2.2. Producción de Biogás en un reactor secuencial lote anaerobio (AnSBR)**

El proceso bajo estudio se llevó a cabo en forma experimental y los detalles se reportan en Arroyo et al. (2020). Para fines de entender el proceso experimental a continuación se describe brevemente el mismo. Se utilizó un AnSBR de 5.1 L. El inóculo era un lodo anaerobio cosechado de un AD a escala de laboratorio operado durante 365 días. El AD a escala de laboratorio se alimentó con lactosuero crudo ( $OLD = 3,6 \text{ gCOD L}^{-1} \text{ d}^{-1}$ ) y funcionó a  $33 \text{ }^\circ\text{C}$ , con un  $\text{pH} = 8$  y  $\text{HRT} = 30 \text{ d}$ . El AnSBR se operó en condiciones mesófilas a  $35^\circ\text{C}$  y  $40^\circ\text{C}$ , y dos valores de  $\text{pH}$ , 5.5 y 7.5. El  $\text{pH}$ , la temperatura, la presión y el flujo de biogás se monitorearon en línea. Los AGV y la DQO se monitorearon fuera de línea utilizando técnicas analíticas estandarizadas. La producción de biogás se midió diariamente utilizando la metodología volumétrica. La composición del biogás se midió mediante cromatografía de gases. Las mediciones de  $\text{pH}$  se muestreó 1 dato por segundo durante 5 días (432.000 puntos) con una precisión de  $\pm 0,02$  utilizando un sistema National Instrument cRIO-9074 con un transmisor de  $\text{pH/ORP}$  Mettler-Toledo M300.

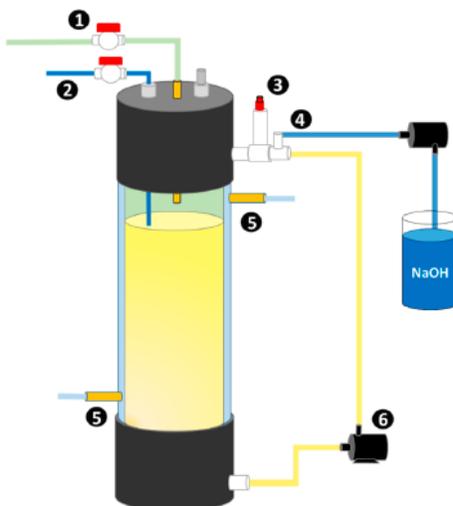


Figura 3.4. Esquema experimental del digester anaerobio: (1) salida de biogás; (2) alimentación; (3) sensor de ph; (4) alimentación de solución de NaOH; (5) Sistema térmico y (6) bomba de recirculación (tomada de Arroyo et al, 2020).

### 3.2.2. Modelo matemático

Se considera el modelo dinámico no estructurado que describe el comportamiento de la AD del lactosuero propuesto por Arrollo et al. (2020). Los parámetros del modelo se estimaron utilizando el método de Levenberg-Marquardt basado en conjuntos de datos experimentales de la configuración experimental descrita anteriormente. Los efectos de las variaciones de pH y temperatura también se consideran en el modelo propuesto. Por lo tanto, este modelo validado experimentalmente se ha utilizado como modelo base para el análisis de observabilidad y los diseños de observadores que se aplican en este proyecto de investigación doctoral.

Las consideraciones principales del modelo son las siguientes:

- (i) Cuatro etapas consecutivas, hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis.
- (ii) Condiciones homogéneas.
- (iii) La carga orgánica se agrupa en dos sustratos,  $S_1$  (g/L) y  $S_2$  (g/L).  $S_1$  agrupa los compuestos de cadena larga (carbohidratos, proteínas y lípidos).  $S_2$  representa compuestos orgánicos simples (carbohidratos y aminoácidos).
- (iv) La biomasa se agrupa en tres especies, la biomasa hidrolítica  $X_h$  (g/L), las bacterias acidogénicas  $X_A$  (g/L) y la biomasa metanogénica,  $X_m$  (g/L).
- (v) Las bacterias acidogénicas  $X_A$  consume el  $S_2$  para producir los AGVs (A).
- (vi) La biomasa metanogénica  $X_m$  produce el biogás (B).

- (vii) Se utiliza una cinética de primer orden para la fase de hidrólisis.
- (viii) La cinética de la etapa de acidogénesis se describe con una cinética de Monod.
- (ix) El crecimiento metanogénico se describe con la cinética de Haldane, que considera la inhibición por AGV.

Los balances de masa sobre la biomasa hidrolítica  $X_h$  (g/L) y el substrato  $S_1$  (g/L) son:

$$\frac{dX_h}{dt} = \mu_h X_h - K_{dh} X_h \quad (3.4)$$

$$\frac{dS_1}{dt} = -\frac{\mu_h X_h}{Y_{X_h/S_1}} \quad (3.5)$$

Donde  $Y_{X_h/S_1}$  es el coeficiente de producción de la biomasa hidrolítica (g $X_h$ /g $S_1$ ).  $K_{dh}$  es la constante de muerte de la bacteria hidrolítica. El modelo cinético para predecir la fase de hidrólisis es descrito con una cinética de primer orden, donde la tasa de crecimiento de la biomasa hidrolítica es dada por:

$$\mu_h = K_h S_1 \quad (3.6)$$

donde  $K_h$  es la constante hidrolítica ( $h^{-1}$ ).

Los balances de masa sobre las bacterias acidogénicas  $X_A$  (g/L) y el substrato  $S_2$  (g/L) son:

$$\frac{dX_A}{dt} = I\mu_a X_A - K_{da} X_A \quad (3.7)$$

$$\frac{dS_2}{dt} = \mu_h X_h Y_{S_2/X_h} - I\frac{\mu_a X_A}{Y_{X_A/S_2}} \quad (3.8)$$

Donde  $Y_{S_2/X_h}$  y  $Y_{X_A/S_2}$  son los coeficientes de producción (g $S_2$ /g $X_h$ ) y degradación (g $X_A$ /g $S_2$ ) de  $S_2$ , respectivamente. La acidogénesis es descrita por una cinética de tipo Monod como:

$$\mu_a = \frac{\mu_{maxa} S_2}{K_{S_2} + S_2} \quad (3.9)$$

donde  $K_{S_2}$  es la constante de saturación para la bacteria acidogénica (g/L) y  $\mu_{maxa}$  es la velocidad de crecimiento máximo ( $h^{-1}$ ).

Finalmente, los balances de masa sobre la biomasa metanogénica  $X_m$  (g/L), los AGVs (g/L) y el metano  $CH_4$  (g/L) son:

$$\frac{dX_m}{dt} = I\mu_m X_m - K_{dm} X_m \quad (3.10)$$

$$\frac{dA}{dt} = I\mu_a X_A Y_{A/X_A} - I\frac{\mu_m X_m}{Y_{X_m/A}} \quad (3.11)$$

$$\frac{dCH_4}{dt} = I\mu_m X_m Y_{CH_4/X_m} \quad (3.12)$$

Donde  $Y_{A/X_a}$ ,  $Y_{X_m/A}$  y  $Y_{CH_4/X_m}$  son los coeficientes de producción (gA/g $X_A$ ) y degradación (g $X_m$ /gA) de AGV's y el coeficiente de producción de metano (g $CH_4$ /g $X_m$ ), respectivamente. La metanogénesis es la fase más sensitiva del proceso; por esta causa se considera una inhibición de AGV's, la cual es descrita por una cinética de tipo Haldane:

$$\mu_m = \frac{\mu_{maxm} A}{K_A + A + A^2/K_I} \quad (3.13)$$

Donde  $\mu_{maxm}$  es la tasa máxima de crecimiento metanogenico y  $K_I$  es la constante de inhibición (g/L).

El efecto del pH y la temperatura está contenido en las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} a &= -0.875(pH_i - 5.5) - 0.0075 \\ Tc_{amb} &= 30.5(pH_i - 5.5) + 35 \\ B &= -0.047(T_p - 35) - 0.365 \\ C &= 0.134(T_p - 35) + 0.93 \\ pH_f &= pH_i + B(pH_i - 5.5) + C \\ pH_c &= pH_i + (pH_f - pH_i)(1 - e^{a(T - Tc_{amb})}) \\ I &= e^{-3\left(\frac{pH - pH_{max}}{pH_{max} - pH_{min}}\right)^2} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Las ecuaciones anteriores son relaciones empíricas que necesitan la estimación de parámetros por cada función. Arroyo et al. (2020), se describe con detalle de la estimación de parámetros con base a los datos experimentales.

### 3.2.3. Simulación Numérica

Para las simulaciones numéricas se consideran los datos de la siguiente Tabla (Arroyo et al. 2020).

Parámetro	pH=7.5;T=40°C	Parámetro	pH=7.5;T=40°C	Parámetro	pH=7.5;T=40°C
$K_{dh}$	0.00308	$K_{da}$	0.0966	$Y_{S_2/X_h}$	23.4012
$K_{S_2}$	16.2475	$K_{dm}$	0.0001	$Y_{X_a/S_2}$	1/1.4623
$K_I$	122.696	$\mu_{maxa}$	0.3015	$Y_{A/X_a}$	17.3287
$K_h$	0.00132	$\mu_{maxm}$	0.1259	$Y_{X_m/A}$	1/147.264
$K_A$	14.0611	$Y_{X_h/S_1}$	1/19.99	$Y_{CH_4/X_m}$	1151.46

Las condiciones iniciales son  $X_h(0)=0.9969$ ,  $S_1(0)=20.3342$ ,  $X_A(0)=1.047$ ,  $S_2(0)=36.1908$ ,  $X_m(0)=0.3287$ ,  $A(0)=94.543$  y  $CH_4(0)=0$ . La simulación se lleva a cabo en el tiempo del proceso que son 120 horas.

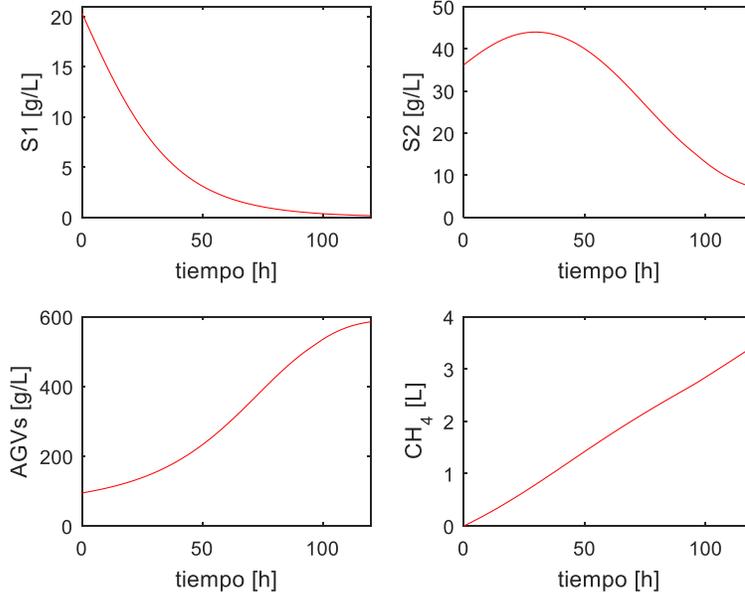


Figura 3.5. Perfiles dinámicos de S<sub>1</sub>, S<sub>2</sub>, A y CH<sub>4</sub>.

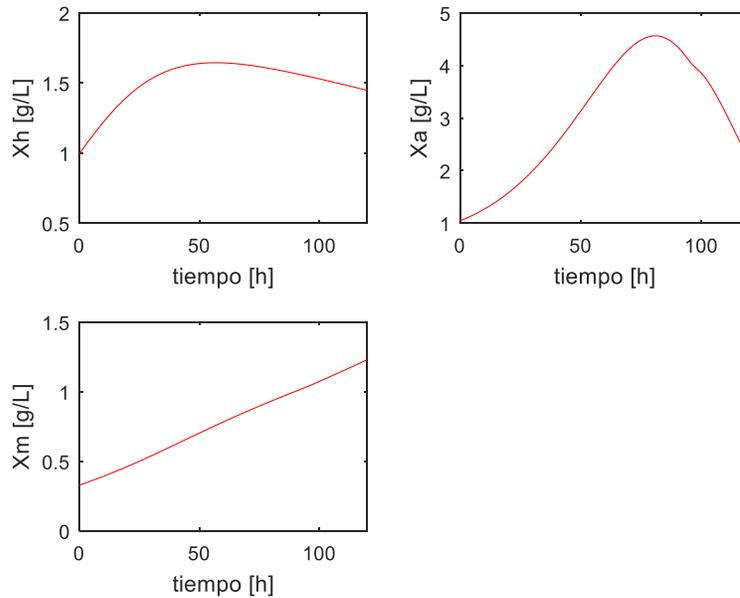


Figura 3.6. Perfiles dinámicos de biomásas X<sub>h</sub>, X<sub>A</sub>, y X<sub>m</sub>.

Debido a que la operación del proceso es lote no se obtiene un punto de operación estacionario. Al final del tiempo de operación se establecen los siguientes valores de los estados del modelo: X<sub>h</sub>=1.4, S<sub>1</sub>=0.2, X<sub>a</sub>=2.2, S<sub>2</sub>=7.1, X<sub>m</sub>=1.2, AGVs=585.2, CH<sub>4</sub>=3.44.

### 3.3. Cultivo de microalgas

#### 3.3.1. Descripción del proceso

El interés en la producción de microalgas se deriva de su capacidad para acumular altas proporciones de carbohidratos y lípidos neutros, que pueden ser utilizados como materia prima para producción de biocombustibles y otros productos de alto valor agregado (Li et al., 2008). Además, las microalgas se consideran como una forma biológica de captura de CO<sub>2</sub> debido a que este se puede tomar de fuentes de emisiones industriales para su uso en la fotosíntesis de las microalgas.

Las microalgas son microorganismos sensibles a la luz que para su crecimiento dependen de las condiciones ambientales, disponibilidad de la luz y nutrientes (Eriksen N. 2008). El cultivo y producción de microalgas se lleva a cabo en sistemas abiertos, tales como estanques y canales, y sistemas cerrados, tales como los foto-fermentadores. Desde un punto de vista de operación, y a una velocidad mayor de crecimiento y con una calidad constante, la operación en foto-fermentadores es la mejor opción (Salama et al., 2017).

Los foto-fermentadores pueden ser tanques agitados, recipientes tubulares, por elevación de gas, y de placa plana. Desde el punto de vista de operación se pueden llevar a cabo en forma lote, semi-lote y continua. El desempeño de los foto-fermentadores para la fijación de CO<sub>2</sub>, la producción de biomasa, lípidos y carbohidratos depende de los parámetros y las condiciones del proceso (Havlik et al., 2015). Más aun, debido a la variabilidad de la disponibilidad de luz y nutrientes, así como la foto-aclimatación e inhibición celular de las microalgas, se requiere un monitoreo preciso de la operación de los foto-fermentadores.

#### 3.2.2. Producción continua de microalgas en un quimiostato

Se considera un quimiostato biológico (reactor tipo tanque agitado de aplicaciones de laboratorio) de volumen  $V$ , hecho de un material transparente. La fuente de luz para el crecimiento de las microalgas se proporciona a través de lámparas externas que rodean el quimiostato. La corriente de entrada con un flujo volumétrico ( $F$ ) contiene el sustrato orgánico de entrada ( $S_{in}$ ). El flujo de salida consiste en el sustrato no consumido ( $S$ ) y la biomasa de microalgas que se produce ( $X$ ).

#### 3.5.2. Modelo Matemático

Varios modelos dinámicos describen el crecimiento de microalgas como una función de las variables de su medioambiente, como los nutrientes y la intensidad de luz (Bernard et al.,

2011). En su trabajo Droop (1968) propone un modelo para el crecimiento de microalgas, que describe la capacidad de éstas de almacenar nutrientes y desacoplamiento entre la tasa de sustrato y crecimiento de biomasa. El almacenamiento de nutriente se representa por una variable intracelular llamada “Quota Q” la cual es definida como la concentración de nutriente interno por la concentración de biomasa. Aun cuando el modelo original fue desarrollado considerando una limitación en vitamina B12, este ha demostrado una gran aplicabilidad para otros sustratos limitantes, como nitratos, fosfatos o silicatos. La reducción de nitrato es de particular interés en aplicaciones que se relacionan a la producción de biodiesel.

Se considera un modelo simple no estructurado y no segregado de tres especies principales para la producción continua de microalgas en el quimiostato (Bernard, 2011). Las consideraciones del modelo son las siguientes (Droop, 1983; Darvehei, Bahri & Moheimani, 2018):

- (i) Condiciones homogéneas.
- (ii) Volumen, intensidad de luz externa y temperatura constantes.
- (iii) La carga orgánica se agrupa en un solo tipo de sustrato, S.
- (iv) La biomasa de microalgas se agrupa en un solo estado, X.
- (v) La cinética del crecimiento de las microalgas se describe con el modelo Droop, que considera un conjunto interno de sustrato (nutrientes) dentro de las células, denotado como la cuota interna Q.

El modelo matemático está dado por:

$$\dot{X} = \mu(Q)X - DX \quad (3.15)$$

$$\dot{S} = -\rho(S)X - DS + DS_{in} \quad (3.16)$$

$$\dot{Q} = \rho(S) - \mu(Q)Q \quad (3.17)$$

donde S (mgN/L), X (mgC/L) y Q (gN/gC) representan las concentraciones de sustrato, biomasa de microalgas y cuota interna, respectivamente. El sustrato de entrada es  $S_{in}$  (mgN/L). La tasa de dilución es  $D(t)=F(t)/V$  ( $d^{-1}$ ).

La tasa de absorción de nutrientes en la biomasa  $\rho(S)$  se modela con una función tipo Monod:

$$\rho(S) = \rho_m \frac{S}{S + K_s} \quad (3.18)$$

Donde  $K_s$  (mgN/L) es la constante de saturación media para el sustrato, y  $\rho_m$  (mgN/mgC\*d) es la velocidad de absorción máxima de nitrógeno inorgánico.

Droop propone que la tasa de crecimiento del alga depende de la cuota intracelular de la siguiente manera:

$$\mu(Q) = \mu_m \left(1 - \frac{Q_0}{Q}\right) \quad (3.19)$$

Donde  $\mu_m$  ( $d^{-1}$ ) es la tasa de crecimiento máximo y  $Q_0$  (mgN/mgC) es la cuota celular mínima bajo la cual el alga no tiene más crecimiento.

### 3.5.3. Simulación Numérica

La operación nominal se simula con los valores de parámetro reportados en la siguiente Tabla (Benavides et al, 2015).

Condiciones Iniciales	Parámetros
$X_{(0)} = 50 \text{ mgC/L}$	$\rho_m = 0.526 \text{ mgN/mgC} \cdot d$
$S_{(0)} = 50 \text{ mgN/L}$	$K_s = 10 \text{ mgN/L}$
$Q_{(0)} = 0.1 \text{ gN/gC}$	$\mu_m = 7.71 \text{ 1/d}$
	$Q_0 = 0.06 \text{ mgN/mgC}$
	$S_{in} = 40 \text{ mg/L}$
	$D = 0.5 \text{ 1/d}$

Con los valores de parámetro anteriores se obtiene un único estado estacionario dado por  $[X, S, Q]^* = [759 \text{ 0 0.06}]$ .

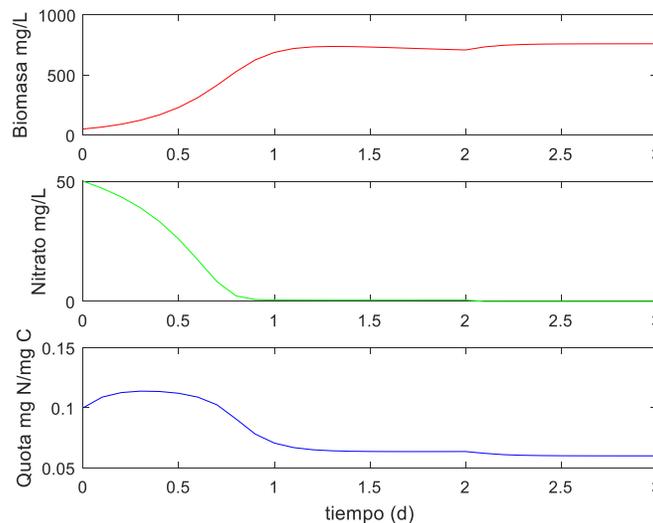


Figura 3.7. Simulación dinámica modelo de Droop.

### 3.5.4 Linealización

Debido a que el modelo tiene una complejidad manejable, se realiza el cálculo de los puntos de equilibrio y la linealización del modelo en los mismos. Los resultados son los siguientes

$$[x_1, x_2, x_3]_{t=3} = [759, 0, 0.06]$$

Con estos se hace el cálculo de los valores propios del sistema para determinar si estos puntos corresponden a un punto estable.

P.E.	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\lambda_3$	Resultado
	-0.5	-7.7	-40.4	Estable

Tabla 4 Puntos de equilibrio del sistema.

## 3.4. Producción de Biodiesel

### 3.4.1. Descripción del proceso

El bioetanol y el biodiesel son los biocombustibles que han generado mayor interés como substitutos potenciales de los combustibles derivados del petróleo. El biodiesel se define como una mezcla de mono-alquil ésteres de cadena larga que se puede producir a partir de aceites vegetales, grasas animales o aceites de rehúso constituidos fundamentalmente por triglicéridos.

Algunas ventajas del biodiesel son: (i) Los compuestos a partir de los cuales se obtienen no contienen cantidades altas de compuestos azufrados, con lo que este tipo de emisiones se reduce. (ii) La combustión del biodiesel es más eficiente que la combustión del diésel convencional, reduciendo la emisión de monóxido de carbono y de hidrocarburos. (iii) Es menos volátil que el diésel convencional, lo que hace más seguro su transporte y almacenamiento.

Una desventaja importante es que su precio es más del doble que el precio del diésel convencional. El costo de biodiesel se puede disminuir con el uso de materia prima con alto contenido de grasa que se considera de poco valor, tales como aceites de semillas de plantas silvestres y grasas atrapadas.

Existen cuatro rutas básicas para la producción de biodiesel a partir de aceites y grasas: (i) transesterificación catalizada por base, (ii) esterificación directa catalizada por ácido, (iii) conversión del aceite en sus ácidos grasos y luego en biodiesel, y (iv) transesterificación no catalítica de aceites y grasas.

La transesterificación es la reacción de un aceite o grasa con un alcohol en presencia de un catalizador para generar ésteres y glicerol. El método de síntesis más común de biodiesel consiste en usar metanol, en la presencia de un catalizador de metóxido

de sodio, para romper químicamente la molécula de triglicéridos en ésteres de metil y glicerol, el sub-producto de esta reacción.

El biodiésel se produce comúnmente en reactores continuos de tanque agitado. Como en la mayoría de los procesos biológicos, su operación no es sencilla al estar afectada por la variación continua de la cantidad y composición de la materia prima, la cinética de la reacción y las condiciones ambientales. Así, su monitoreo para fines de diagnóstico del desempeño del proceso y diseños de control es fundamental.

### **3.4.2. Producción de Biodiesel en un CSTR con grasas atrapadas**

Aguilar-Garnica et al. (2014) presentaron un modelo de biodiesel a partir de grasas atrapadas en alcantarillas de cocina. Para fines de claridad en la descripción del caso de estudio se describen brevemente los detalles experimentales.

Los residuos de trampa de grasa recuperados para el estudio contenían sólidos en suspensión, humedad, triglicéridos y ácidos grasos libres (FFA). Los residuos secos contenían alrededor de 84 % de FFA. Se preparó una mezcla 4:1 (m/m) de desechos de la trampa de grasa seca con aceite de canola comercial. El metanol (M) fue de grado reactivo industrial con un contenido de humedad del 0,3%, y ácido sulfúrico de grado reactivo industrial.

La reacción de esterificación,  $FFA + M \leftrightarrow E + W$ , donde  $E$  denota el éster orgánico y  $W$  es agua, se llevó a cabo en un reactor agitado de vidrio de 1 L. La temperatura del reactor se monitoreo con un multisensor Xplorer GLX PS-2002. El reactor se sumergió en un baño de agua con temperatura monitoreada (sensor tipo J) y controlada con un control PID. Los residuos de la trampa de grasa se suministraron a la parte superior del reactor a una concentración  $C_{Ai}$ , una temperatura  $T_{AG}$  y un flujo volumétrico  $F_{AG}$  junto con una mezcla de metanol/ $H_2SO_4$  a un flujo volumétrico  $F_{Mix}$  y una temperatura  $T_{Mix}$ . La relación molar entre el metanol y el contenido de FFA es de aproximadamente 20: 1. La Figura 3.8 muestra el esquema del reactor.

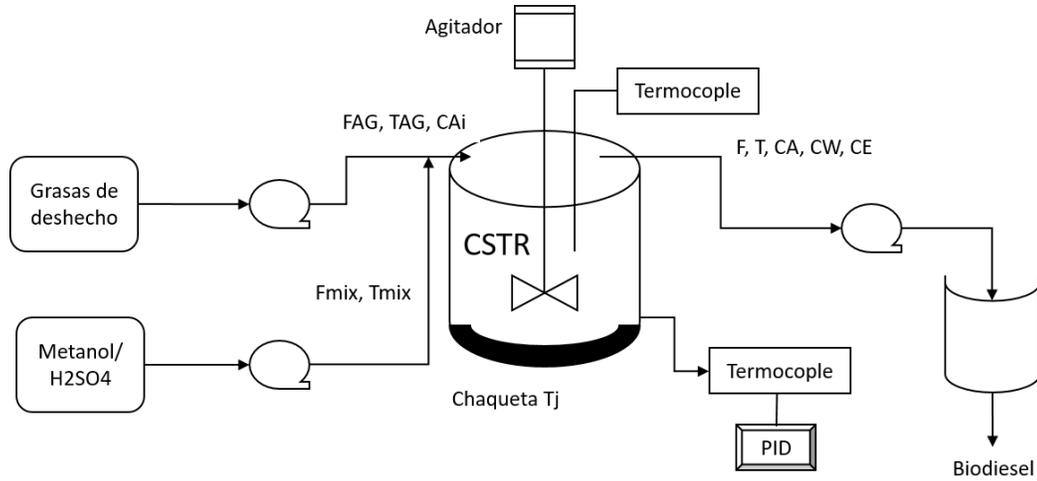


Figura 3.8. Diagrama de esterificación de grasas de deshecho en un CSTR (tomada de Aguilar-Garnica et al, 2014).

### 3.4.2. Modelo Matemático

Aguilar-Garnica (2016) presenta el modelo del proceso y su validación con los datos generados por el experimento arriba descrito. Las consideraciones principales para derivar el modelo son las siguientes:

- (i) Condiciones homogéneas.
- (ii) Volumen constante.
- (iii) Un exceso de metanol sobre el contenido de FFA.
- (iv) Se supone que la reacción de esterificación es de primer orden para la formación de productos y de segundo orden en la dirección inversa.

El modelo resultante es el siguiente:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F_{FFA}C_{Ai}}{V} - \frac{FC_A}{V} - k_1C_M(0) \left( C_A - \frac{C_EC_W}{K_{eq}C_M(0)} \right) \quad (3.20)$$

$$\frac{dC_E}{dt} = -\frac{FC_E}{V} + k_1C_M(0) \left( C_A - \frac{C_EC_W}{K_{eq}C_M(0)} \right) \quad (3.21)$$

$$\frac{dC_W}{dt} = -\frac{FC_W}{V} + k_1C_M(0) \left( C_A - \frac{C_EC_W}{K_{eq}C_M(0)} \right) \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dt} = & \frac{F_{FFA}\rho_{FFA}\gamma_{FFA}}{\rho V \gamma_P} (T_{AG} - T) + \frac{F_{Mix}\rho_{Mix}\gamma_{Mix}}{\rho V \gamma_P} (T_{Mix} - T) + \frac{U}{\rho V \gamma_P} (T_j - T) \\ & - \frac{\Delta H}{\rho \gamma_P} k_1C_M(0) \left( C_A - \frac{C_EC_W}{K_{eq}C_M(0)} \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

En este modelo  $t$  es el tiempo del proceso.  $T_{AG}$  y  $T_{mix}$  denotan la temperatura para las grasas residuales y la mezcla metanol/H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>.  $V$  es el volumen efectivo del medio de reacción,  $\rho_{FFA}$ ,  $\rho_{Mix}$ ,  $\rho$ ,  $\gamma_{FFA}$ ,  $\gamma_{Mix}$ ,  $\gamma_F$  representan las densidades y capacidades caloríficas de los residuos de grasas, la mezcla metanol/H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> y los productos de reacción respectivamente.  $U$  es el coeficiente de transferencia de calor,  $\Delta H$  es la entalpia de reacción y  $C_{Ai}$  es la concentración de entrada de FFAs (ácidos grasos libres).

Los estados del modelo  $C_A$ ,  $C_E$ , y  $C_w$  representan la concentración de FFA, esteres orgánicos (i.e. biodiesel) y agua, respectivamente.  $T$  representa la temperatura del medio de reacción.  $C_M(0)$  es la concentración inicial de metanol el cual es considerado a ser constante ya que es un agente en exceso.

El flujo de salida  $F$  se selecciona como la suma de los flujos de entrada para evitar la acumulación de masa dentro del reactor:  $F = (\rho_{FFA}F_{FFA} + \rho_{Mix}F_{Mix})/\rho$ . Finalmente,  $k_1$  es la velocidad de reacción específica descrita por la ecuación de Arrhenius,

$$k_1 = k_0 \exp\left(\frac{-E_a}{R_{ig}T}\right) \quad (3.24)$$

donde  $k_0$  es el factor pre-exponencial,  $R_{ig}$  es la constante de gas ideal,  $E_a$  es la energía de activación.

La constante de equilibrio  $K_{eq}$  se representa por la ecuación de Van't Hoff:

$$k_{eq} = k_{eq1} \exp\left(\frac{-\Delta H}{R_{ig}} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_1}\right]\right) \quad (3.25)$$

donde  $K_{eq1}$  es la constante de equilibrio a la temperatura  $T_1$ .

### 3.4.3. Simulación Numérica

En el caso del proceso de producción de biodiesel los valores de los parámetros y las constantes fueron tomados del trabajo de Aguilar-Garnica (2016), los valores son:

Parámetro		Parámetro		$E_a$	7.174
$F_{FFA}$	0.0029	$\rho_{Mix}$	0.720	$U$	392.7
$F_{Mix}$	0.0075	$\rho$	0.817	$K_0$	0.484
$T_{AG}$	334	$\gamma_{FFA}$	2170	$\Delta H$	30.986
$T_{Mix}$	334	$\gamma_{Mix}$	2700	$K_{eq1}$	0.465
$\rho_{FFA}$	0.873	$\gamma_P$	2530	$T_1$	313

Las condiciones iniciales son:  $C_A(0)=0.0155$ ,  $T(0)=314$ ,  $C_E(0)=0.121$ ,  $C_w(0)=0.577$  y  $C_M(0)=14.62$ .

Además, en las simulaciones se muestran cambios en  $T_j$  y  $C_{Ai}$ :

- $0 \leq t < 60$ ,  $T_j=313$ ,  $C_{Ai}=2.7$ .
- $60 \leq t < 120$ ,  $T_j=333$ ,  $C_{Ai}=2.7$ .
- $120 \leq t < 180$ ,  $T_j=313$ ,  $C_{Ai}=2.7$ .
- $t \geq 180$ ,  $T_j=313$ ,  $C_{Ai}=0.675$ .

Las simulaciones numéricas se presentan en la siguiente figura:

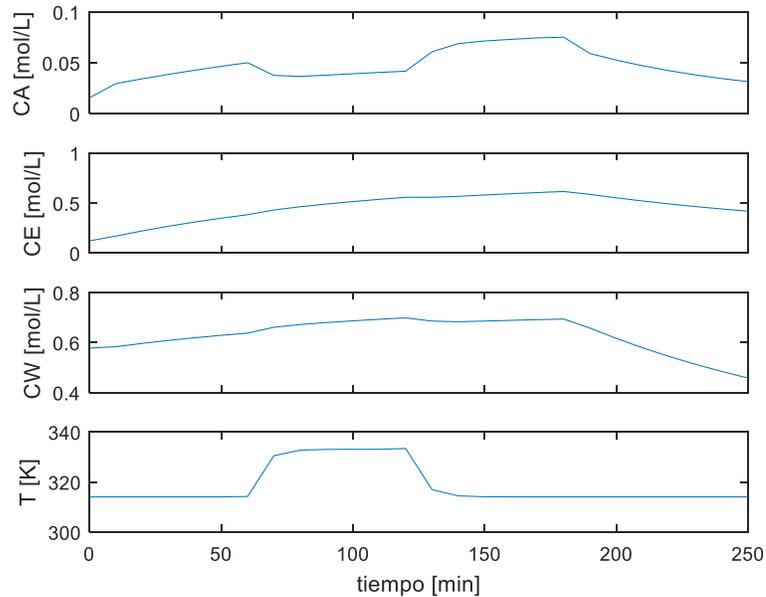


Figura 3.9. Perfiles dinámicos de los estados del modelo de Biodiesel.

Los resultados que se muestran son a un tiempo de 250 minutos, el cual se tomara para analizar puntos de equilibrio en el tiempo de operación.

### 3.4.4 Linealización

Aunque el modelo tiene cierta complejidad, se realiza el cálculo de los puntos de equilibrio, Los resultados son:

$$[x_1, x_2, x_3, x_4]_{t=250} = [0.0254, 0.3903, 0.424, 314.02]$$

Con estos se hace el cálculo de los valores propios del sistema para determinar si estos puntos corresponden a un punto estable, de los resultados en la tabla siguiente se puede ver que nos dicen que es un punto estable.

P.E.	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\lambda_3$	$\lambda_4$	Resultado
	-0.55	-0.19	-0.01	-0.01	Estable

Tabla 9 Puntos de equilibrio del sistema.

## Capítulo 4

### Análisis de Observabilidad

En este Capítulo se presenta el estudio de observabilidad de los casos de estudio. El estudio incluye el análisis de la propiedad de observabilidad usando el método convencional de rango de Kalman con la matriz de observabilidad con linealización estándar y el criterio PBH, y los métodos no convencionales usando diagramas de inferencia, la condición de rango con la matriz de observabilidad con derivadas de Lie, el gramiano empírico, y el método estructural. Además, se analiza el grado de observabilidad en diferentes regiones de operación.

#### 4.1. Metodología de Análisis de Observabilidad Propuesta

Con base al marco teórico que se presenta en el capítulo anterior, a la revisión del estado del arte, y las mediciones disponibles que sean económicas, fáciles y rápidas, se establece la siguiente metodología para el estudio de la observabilidad para cada caso de estudio:

1. Identificación de la o las variables medibles para cada caso de estudio para fines de estimación de las variables no medibles.
2. Estudio de observabilidad preliminar convencional.
3. Estudio de observabilidad no convencional.
4. Estudio del grado de observabilidad.

Con base a los resultados que se obtengan se va a identificar para cada caso de estudio si es posible o no estimar los estados no medibles a partir de la medición disponible e identificar regiones de operación con degradación en la estimación de estados.

#### 4.2. Observabilidad de la producción de hidrógeno por foto-fermentación en un CSTR

##### 4.2.1. Mediciones disponibles

En la producción de  $H_2$  por foto-fermentación que se describe en el capítulo anterior, se considera un modelo de tres estados: el substrato, la biomasa, y el volumen de gas  $H_2$  que se produce. Diversos trabajos han considerado la medición del substrato o la biomasa para fines de estimación en esta clase de procesos. Sin embargo, para su medición se requiere tiempos de medición importantes usando métodos estándar o bien requieren dispositivos de medición costosos.

En efecto, en este tipo de procesos el monitoreo de las variables involucradas tiene diferentes grados de complejidad y algunas de ellas se tiene que hacer una medición de fuera de línea por diferentes métodos. Por ejemplo, en un proceso de producción de biohidrógeno a través de fermentación oscura, Torres et al (2018) consideran el monitoreo fuera de línea para las variables de concentraciones de glucosa (sustrato) a la entrada y salida del reactor determinada por los métodos propuestos por Dubois et al. (1956). Los sólidos suspendidos volátiles de acuerdo con métodos estándar (ALPHA et al., 2012). La composición del biogás es por métodos cromatográficos (SRI modelo 8610C). La concentración de etanol y ácidos grasos volátiles (acetato, propianato y butirato) se hacen por métodos cromatográficos. El monitoreo de la biomasa no se hace por cuestiones prácticas.

Torres et al. (2018) consideran como el sistema de adquisición de datos en línea el flujo de biogás producido. Esto se hace con contador de flujo de gas (Ritter. Inc) conectado a un dispositivo de adquisición de datos. El porcentaje de biohidrógeno en la corriente de gas se determina también en línea usando un analizador OPTIMA (modelo 7000, H2 scan). Así por cuestiones prácticas se considera que el biohidrógeno está disponible para su uso en los análisis de observabilidad que se presentan para este caso de estudio. Además, para fines de un análisis más completo se calcula el análisis básico de observabilidad considerando la medición de sustrato.

#### **4.2.2. Análisis de Observabilidad Convencional: Prueba de Kalman y Criterio de PBH**

El análisis se realiza considerando la matriz A del sistema linealizado que se presenta en el capítulo anterior, y dos casos de la medición disponible:

- (i) La medición de sustrato, de forma que la ecuación de mediciones es,

$$y = S = Cx = [1 \ 0 \ 0]x$$

- (ii) La medición de H<sub>2</sub>, de forma que la ecuación de mediciones es,

$$y = H_2 = Cx = [0 \ 0 \ 1]x$$

Donde  $x$  es el vector de estados  $x = [x_1 \ x_2 \ x_3] = [S \ X \ H_2]$ .

La observabilidad se evalúa a lo largo de la trayectoria en todo el tiempo de simulación con la finalidad de evaluar posibles regiones de pérdida de observabilidad. Las Figuras 4.1 y 4.2 muestran los resultados del rango de la matriz de observabilidad con base a la medición de sustrato y H<sub>2</sub>, respectivamente.

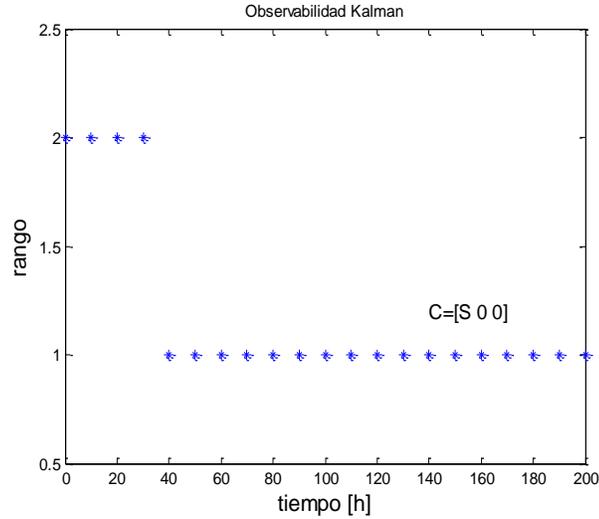


Figura 4.1. Análisis de observabilidad (prueba de Kalman) de la foto-fermentación de H<sub>2</sub> con la medición de sustrato.

Los resultados numéricos con la medición del hidrogeno producido son los siguientes:

$$\frac{dx_1}{dt} = u(p_6 - x_1) - \frac{1}{p_1} \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} x_2$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -u x_2 + \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} x_2$$

$$\frac{dx_3}{dt} = -u x_3 + p_4 \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} x_2 + p_5 x_2$$

Donde  $u$  es la dilución, y  $p_1 = Y_{x/s}$ ,  $p_1 = \mu_m$ ,  $p_3 = k_s$ ,  $p_4 = \varphi/Y_{x/H}$ ,  $p_5 = \delta$ ,  $p_6 = x_{1in}$  son parámetros cinéticos y la carga orgánica de entrada. Por cuestiones practicas en la muestra de los resultados numéricos se hace el cambio de variable  $x_1=S$ ,  $x_2=X$ ,  $x_3=H_2$ .

La variable medida es el hidrogeno, es decir,

$$y = x_3 = Cx = [0 \ 0 \ 1]x$$

Las derivadas respecto a los estados (Jacobiano A) considerando un valor base de  $u$  como,  $u=0.035$ .

$$A_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial f_3}{\partial x_1} & \frac{\partial f_3}{\partial x_2} & \frac{\partial f_3}{\partial x_3} \end{bmatrix}$$

$$A = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = \begin{bmatrix} -u + \frac{p_2 x_1 x_2}{p_1 (p_3 + x_1)^2} - \frac{p_2 x_2}{p_1 (p_3 + x_1)} & \frac{p_2 x_1}{p_1 (p_3 + x_1)} & 0 \\ \frac{p_2 x_2}{(p_3 + x_1)} - \frac{p_2 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} & -u + \frac{p_2 x_1}{(p_3 + x_1)} & 0 \\ \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_1)} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} & p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)} & -u \end{bmatrix}$$

Matriz de Observabilidad de Kalman

$$O = \begin{bmatrix} C \\ CA \\ CA^2 \end{bmatrix}$$

$$O = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_1)} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} & p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)} & u \\ J_{31} & J_{32} & u^2 \end{bmatrix}$$

$$J_{31} = \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)} \right) \left( \frac{p_2 x_2}{(p_3 + x_1)} - \frac{p_2 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) - u \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_1)} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) - \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_1)} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \left( u + \frac{p_2 x_2}{p_1 (p_3 + x_1)} - \frac{p_2 x_1 x_2}{p_1 (p_3 + x_1)^2} \right)$$

$$J_{32} = \left( \frac{p_2 x_1}{p_1 (p_3 + x_1)} \right) \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_1)} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) - \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)} \right) \left( u - \frac{p_2 x_1}{(p_3 + x_1)} \right) - u \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)} \right)$$

De la matriz de observabilidad resultante, el determinante se puede calcular en forma simple por medio de co-factores eligiendo la fila 1 como referencia. Entonces,

$$|O| = +1 * \begin{bmatrix} J_{21} & J_{22} \\ J_{31} & J_{32} \end{bmatrix} = J_{21} J_{32} - J_{22} J_{31}$$

Lo que resulta en la siguiente expresión,

$$\begin{aligned}
|O| = & \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_1)} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \left( \left( \frac{p_2 x_1}{p_1 (p_3 + x_1)} \right) \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_1)} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \right. \\
& - \left. \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)} \right) \left( u - \frac{p_2 x_1}{(p_3 + x_1)} \right) - u \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)} \right) \right) \\
& - \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)} \right) \left( \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)} \right) \left( \frac{p_2 x_2}{(p_3 + x_1)} - \frac{p_2 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \right. \\
& - \left. u \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_1)} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \right) \\
& - \left. \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_1)} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \left( u + \frac{p_2 x_2}{p_1 (p_3 + x_1)} - \frac{p_2 x_1 x_2}{p_1 (p_3 + x_1)^2} \right) \right)
\end{aligned}$$

Al desarrollar la expresión anterior (no se muestra), se identifica que, para el caso de la condición de lavado, o que la biomasa sea cero, el sistema es no observable. Para valores de la biomasa distintos de cero, aun en el caso de consumo de sustrato completo, el sistema es observable.

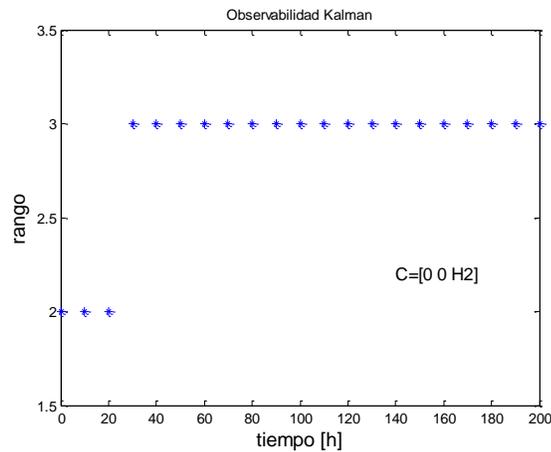


Figura 4.2. Análisis de observabilidad (prueba de Kalman) de la foto-fermentación de H<sub>2</sub> con la medición del volumen de gas de hidrógeno.

Los resultados muestran que con la medición de sustrato el proceso de foto-fermentación de H<sub>2</sub> no es completamente observable. Por otro lado, al considerar la medición del H<sub>2</sub>, se observa que es posible la inferencia de los estados no medibles a partir de la medición de H<sub>2</sub> en prácticamente todo el tiempo de simulación. Se debe notar que un estudio convencional de observabilidad comúnmente se restringe a la condición en estado estacionario, que corresponde a los resultados que se muestran al final en las Figuras 4.1 y 4.2. En el tiempo inicial de simulación se observa que el sistema es no observable, lo cual

se puede asociar a los transitorios iniciales por las condiciones iniciales o a la baja concentración de H<sub>2</sub>.

Con los resultados de la observabilidad de Kalman se selecciona la segunda propuesta de estados medibles de la medición del hidrógeno y se aplica el criterio de observabilidad de PBH.

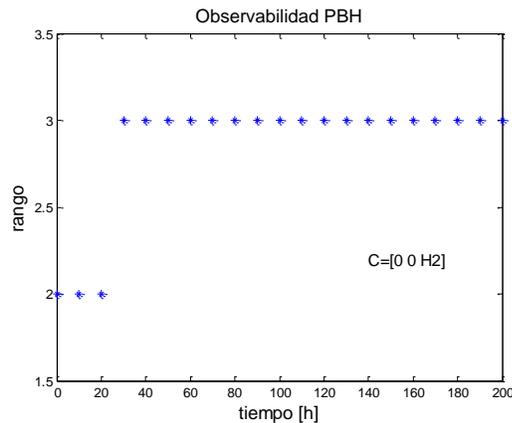


Figura 4.3. Análisis de observabilidad (criterio PBH) de la producción de H<sub>2</sub> por foto-fermentación con la medición del volumen de gas de hidrogeno.

La Figura 4.3 muestra los resultados que se obtienen, que conducen a los mismos resultados de la prueba de observabilidad de Kalman.

### 4.2.3. Análisis de Observabilidad No Convencional

#### **Matriz de observabilidad no-lineal: Linealización con derivadas de Lie**

La extensión de la observabilidad de Kalman para sistemas no-lineales se basa en determinar el rango de la matriz de observabilidad usando las derivadas de Lie del modelo no-lineal del proceso. Debido a que el cálculo de las derivadas de Lie puede ser tedioso para modelos complejos o con no-linealidades importantes, tales como los bioprocesos, es común que el análisis de observabilidad se restrinja al enfoque convencional.

Los resultados numéricos son los siguientes:

Derivadas de Lie: La derivada de Lie de  $y=h(x)$ , con respecto al vector de estados  $f(x)$ , es,

$$L_f h(x) = \frac{\partial h(x)}{\partial x} f(x)$$

Donde,

$$f(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ \dots \\ f_N(x) \end{bmatrix}$$

Entonces,

$$L_f h(x) = \left[ \frac{\partial h(x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial h(x)}{\partial x_N} \right] \begin{bmatrix} f_1(x) \\ \dots \\ f_N(x) \end{bmatrix}$$

Que conduce a un valor escalar.

El cálculo de las derivadas de Lie recursivas o de alto orden es,

$$L_f^k h(x) = \frac{\partial (L_f^{k-1} h(x))}{\partial x} f(x)$$

con

$$L_f^0 h(x) = h(x)$$

La prueba de observabilidad local alrededor de  $x_0$  es que la matriz siguiente sea de rango completo,

$$O = \begin{bmatrix} \frac{\partial L_f^0 h(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial L_f^0 h(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial L_f^0 h(x)}{\partial x_N} \\ \frac{\partial L_f^1 h(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial L_f^1 h(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial L_f^1 h(x)}{\partial x_N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial L_f^{N-1} h(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial L_f^{N-1} h(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial L_f^{N-1} h(x)}{\partial x_N} \end{bmatrix}$$

Para el caso de estudio se tienen las siguientes derivadas de Lie de la medición  $y = x_3$ ,

$$L_f^0 h(x) = x_3$$

$$\begin{aligned} L_f^1 h(x) &= \frac{\partial (L_f^0 h(x))}{\partial x} f(x) = \frac{\partial (x_3)}{\partial x} f(x) = [0 \quad 0 \quad 1] \begin{bmatrix} u(p_6 - x_1) - \frac{1}{p_1 p_3 + x_1} p_2 x_1 x_2 \\ -u x_2 + \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} x_2 \\ -u x_3 + p_4 \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} x_2 + p_5 x_2 \end{bmatrix} \\ &= -u x_3 + p_4 \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} x_2 + p_5 x_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_f^2 h(x) &= \frac{\partial (L_f^1 h(x))}{\partial x} f(x) = \frac{\partial \left( -ux_3 + p_4 \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} x_2 + p_5 x_2 \right)}{\partial x} f(x) \\
&= \left[ p_4 \frac{p_2 x_2}{p_3 + x_1} - \frac{p_4 p_2 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \quad p_5 + p_4 \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} \quad -u \right] \begin{bmatrix} u(p_6 - x_1) - \frac{1}{p_1} \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} x_2 \\ -ux_2 + \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} x_2 \\ -ux_3 + p_4 \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} x_2 + p_5 x_2 \end{bmatrix} \\
&= \left( p_4 \frac{p_2 x_2}{p_3 + x_1} - \frac{p_4 p_2 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \left( u(p_6 - x_1) - \frac{1}{p_1} \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} x_2 \right) \\
&\quad + \left( p_5 + p_4 \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} \right) \left( -ux_2 + \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} x_2 \right) - u \left( -ux_3 + p_4 \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} x_2 + p_5 x_2 \right)
\end{aligned}$$

Al tomar las derivadas de las derivadas de Lie respecto a los estados conduce a,

$$O = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ p_4 \frac{p_2 x_2}{p_3 + x_1} - \frac{p_4 p_2 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} & p_5 + p_4 \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} & -u \\ J_{31} & J_{32} & u^2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
J_{31} &= \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{p_3 + x_1} \right) \left( \frac{p_2 x_2}{p_3 + x_1} - \frac{p_2 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) - \left( ux_2 - \frac{p_2 x_1 x_2}{p_3 + x_1} \right) \left( \frac{p_2 p_4}{p_3 + x_1} - \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)^2} \right) \\
&\quad - \left( u(p_6 - x_1) - \frac{1}{p_1} \frac{p_2 x_1 x_2}{p_3 + x_1} \right) \left( \frac{2p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_1)^2} - \frac{2p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^3} \right) \\
&\quad - u \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{p_3 + x_1} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \\
&\quad - \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{p_3 + x_1} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \left( u + \frac{p_2 x_2}{p_1 (p_3 + x_1)} - \frac{p_2 x_1 x_2}{p_1 (p_3 + x_1)^2} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_{32} &= \left( u(p_6 - x_1) - \frac{1}{p_1} \frac{p_2 x_1 x_2}{p_3 + x_1} \right) \left( \frac{p_2 p_4}{p_3 + x_1} - \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)^2} \right) - u \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{p_3 + x_1} \right) \\
&\quad - \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{p_3 + x_1} \right) \left( u - \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} \right) - \left( \frac{p_2 x_1}{p_1 (p_3 + x_1)} \right) \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{p_3 + x_1} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right)
\end{aligned}$$

De la matriz de observabilidad resultante, el determinante se puede calcular en forma simple por medio de co-factores eligiendo la fila 1 como referencia. Entonces,

$$|Ob| = +1 * \begin{bmatrix} J_{21} & J_{22} \\ J_{31} & J_{32} \end{bmatrix} = J_{21} J_{32} - J_{22} J_{31}$$

Lo que resulta en la siguiente expresión,

$$\begin{aligned}
 & \left( p_4 \frac{p_2 x_2}{p_3 + x_1} - \frac{p_4 p_2 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \left( \left( u(p_6 - x_1) - \frac{1}{p_1} \frac{p_2 x_1 x_2}{p_3 + x_1} \right) \left( \frac{p_2 p_4}{p_3 + x_1} - \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)^2} \right) \right. \\
 & \quad - u \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)} \right) - \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)} \right) \left( u - \frac{p_2 x_1}{(p_3 + x_1)} \right) \\
 & \quad \left. - \left( \frac{p_2 x_1}{p_1 (p_3 + x_1)} \right) \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_1)} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \right) \\
 & \quad - \left( p_5 + p_4 \frac{p_2 x_1}{p_3 + x_1} \right) \left( \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_1}{p_3 + x_1} \right) \left( \frac{p_2 x_2}{p_3 + x_1} - \frac{p_2 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \right. \\
 & \quad \left. - \left( u x_2 - \frac{p_2 x_1 x_2}{p_3 + x_1} \right) \left( \frac{p_2 p_4}{p_3 + x_1} - \frac{p_2 p_4 x_1}{(p_3 + x_1)^2} \right) \right) \\
 & \quad - \left( u(p_6 - x_1) - \frac{1}{p_1} \frac{p_2 x_1 x_2}{p_3 + x_1} \right) \left( \frac{2 p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_1)^2} - \frac{2 p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^3} \right) \\
 & \quad - u \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{p_3 + x_1} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \\
 & \quad \left. - \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{p_3 + x_1} - \frac{p_2 p_4 x_1 x_2}{(p_3 + x_1)^2} \right) \left( u + \frac{p_2 x_2}{p_1 (p_3 + x_1)} - \frac{p_2 x_1 x_2}{p_1 (p_3 + x_1)^2} \right) \right)
 \end{aligned}$$

Al desarrollar la expresión anterior (no se muestra), se identifica que, para el caso de la condición de lavado, o que la biomasa sea cero, el sistema es no observable. Para valores de la biomasa distintos de cero, aun en el caso de consumo de substrato completo, el sistema es observable.

Para este caso de estudio, la Figura 4.4 muestra la evaluación del rango con la matriz de observabilidad construida con derivadas de Lie a lo largo del tiempo de simulación del proceso. Los resultados de las matrices no se presentan por claridad en la presentación.

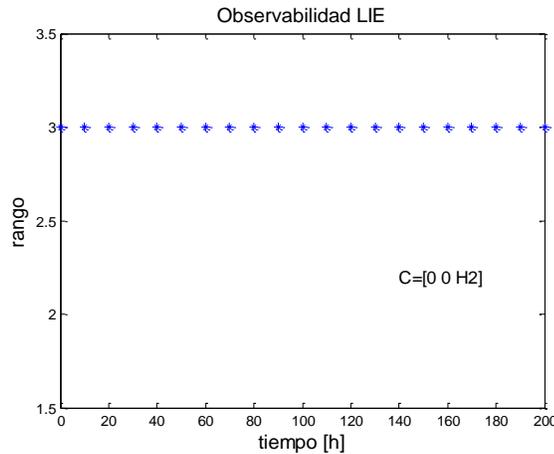


Figura 4.4. Análisis de rango con el monitoreo del hidrógeno.

Se puede observar que, en este caso, el rango completo se mantiene durante todo el tiempo de integración, sin afectar los transitorios iniciales, cumpliéndose el criterio de observabilidad.

### Diagrama de Inferencia

El análisis de observabilidad por diagramas de inferencia es relativamente nuevo en su estudio y aplicación en bioprocesos. El análisis explota la estructura del modelo matemático no-lineal del proceso para identificar conexiones entre los estados del proceso.

Utilizando la metodología descrita en el capítulo 2, se formula el diagrama de inferencia para la foto-fermentación de bio-H<sub>2</sub> considerando el monitoreo de H<sub>2</sub>, con sus representaciones de derivadas de Lie respectivas.

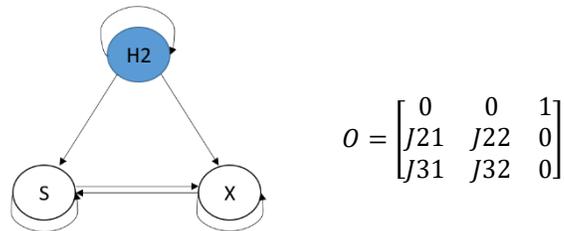


Figura 4.5. Análisis de observabilidad (diagrama de inferencia) para la foto-fermentación de hidrógeno.

Del diagrama de inferencia se observa que el hidrógeno no tiene relación directa con el sustrato y la biomasa al no aparecer esta variable en las dos ecuaciones del modelo. Por otro lado, de las flechas de salida del H<sub>2</sub> se establece que es posible obtener información del sustrato y de la biomasa a partir de la medición de H<sub>2</sub>.

### Observabilidad Estructural

Al explotar las propiedades estructurales de la observabilidad, Montanari y Aguirre (2020) y Lecca y Ree (2019), establecen la observabilidad a partir de las propiedades de invertibilidad de una matriz o mapeo que asocia a la variable medible con los estados no medibles.

El análisis de observabilidad siguiendo la metodología de Lecca y Ree (2019) se presenta a continuación para la producción de hidrogeno por foto-fermentación. Por conveniencia del análisis, se considera el sistema dado por el modelo del foto-fermentador,

$$\frac{dx_1}{dt} = -ux_1 + p_4 \frac{p_2 x_3}{p_3 + x_3} x_2 + p_5 x_2$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -ux_2 + \frac{p_2 x_3}{p_3 + x_3} x_2$$

$$\frac{dx_3}{dt} = u(p_6 - x_3) - \frac{1}{p_1} \frac{p_2 x_3}{p_3 + x_3} x_2$$

Donde  $u$  es la dilución, y  $p_1 = Y_{x/s}$ ,  $p_2 = \mu_m$ ,  $p_3 = k_s$ ,  $p_4 = \varphi/Y_{x/H}$ ,  $p_5 = \delta$ ,  $p_6 = x_{1in}$  son parámetros cinéticos y la carga orgánica de entrada, en este caso para acomodo de los resultados numéricos  $x_1=H_2$ ,  $x_2=X$ ,  $x_3=S$ .

La salida y sus derivadas hasta el orden  $n-1$  están dadas como sigue,

$$y = H_2 = x_1$$

Primera derivada,

$$\frac{dy}{dt} = \frac{dx_1}{dt} = -ux_1 + p_4 \frac{p_2 x_3}{p_3 + x_3} x_2 + p_5 x_2$$

Segunda derivada,

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = p_5 \frac{dx_2}{dt} - u \frac{dx_1}{dt} + \frac{p_4 p_2 x_3}{p_3 + x_3} \frac{dx_2}{dt} + \frac{p_4 p_2 x_2}{p_3 + x_3} \frac{dx_3}{dt} - \frac{p_4 p_2 x_3 x_2}{(p_3 + x_3)^2} \frac{dx_3}{dt}$$

Sustituyendo las derivadas de los estados del modelo,

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = -u \frac{dx_1}{dt} + \left( p_5 + \frac{p_4 p_2 x_3}{p_3 + x_3} \right) \frac{dx_2}{dt} + \left( \frac{p_4 p_2 x_2}{p_3 + x_3} - \frac{p_4 p_2 x_3 x_2}{(p_3 + x_3)^2} \right) \frac{dx_3}{dt}$$

Reordenando la segunda derivada,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 y}{dt^2} = & -u \left( -ux_1 + p_4 \frac{p_2 x_3}{p_3 + x_3} x_2 + p_5 x_2 \right) + \left( p_5 + \frac{p_4 p_2 x_3}{p_3 + x_3} \right) \left( -ux_2 + \frac{p_2 x_3}{p_3 + x_3} x_2 \right) \\ & + \left( \frac{p_4 p_2 x_2}{p_3 + x_3} - \frac{p_4 p_2 x_3 x_2}{(p_3 + x_3)^2} \right) \left( u(p_6 - x_3) - \frac{1}{p_1} \frac{p_2 x_3}{p_3 + x_3} x_2 \right) \end{aligned}$$

Con base a la medición y sus derivadas hasta el orden  $n-1$ , se obtiene un arreglo matricial  $Q$ , el cual está dado por,

$$Q = \begin{bmatrix} y \\ \frac{dy}{dt} \\ \frac{d^2 y}{dt^2} \end{bmatrix}$$

Sustituyendo las derivadas

$$Q = \begin{bmatrix} x_1 \\ -ux_1 + p_4 \frac{p_2 x_3}{p_3 + x_3} x_2 + p_5 x_2 \\ -u \left( -ux_1 + p_4 \frac{p_2 x_3}{p_3 + x_3} x_2 + p_5 x_2 \right) + \left( p_5 + \frac{p_4 p_2 x_3}{p_3 + x_3} \right) \left( -ux_2 + \frac{p_2 x_3}{p_3 + x_3} x_2 \right) + \left( \frac{p_4 p_2 x_2}{p_3 + x_3} - \frac{p_4 p_2 x_3 x_2}{(p_3 + x_3)^2} \right) \left( u(p_6 - x_3) - \frac{1}{p_1} \frac{p_2 x_3}{p_3 + x_3} x_2 \right) \end{bmatrix}$$

De este arreglo matricial se calcula su jacobiano, el cual conduce a:

$$JQ = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -u & p_5 + \frac{p_2 p_4 x_3}{(p_3 + x_3)} & \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_3)} - \frac{p_2 p_4 x_2 x_3}{(p_3 + x_3)^2} \\ u^2 & JQ_{32} & JQ_{33} \end{bmatrix}$$

$$JQ_{32} = \left( u(p_6 - x_3) - \frac{p_2 x_2 x_3}{p_1(p_3 + x_3)} \right) \left( \frac{p_2 p_4}{(p_3 + x_3)} - \frac{p_2 p_4 x_3}{(p_3 + x_3)^2} \right) - u \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_3}{(p_3 + x_3)} \right) \\ - \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_3}{(p_3 + x_3)} \right) \left( u - \frac{p_2 x_3}{(p_3 + x_3)} \right) - \left( \frac{p_2 x_3}{(p_1(p_3 + x_3))} \right) \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_3)} - \frac{p_2 p_4 x_2 x_3}{(p_3 + x_3)^2} \right)$$

$$JQ_{33} = \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_3}{(p_3 + x_3)} \right) \left( \frac{p_2 x_2}{(p_3 + x_3)} - \frac{p_2 x_2 x_3}{(p_3 + x_3)^2} \right) \\ - \left( u x_2 - \frac{p_2 x_2 x_3}{(p_3 + x_3)} \right) \left( \frac{p_2 p_4}{(p_3 + x_3)} - \frac{p_2 p_4 x_3}{(p_3 + x_3)^2} \right) \\ - \left( u(p_6 - x_3) - \frac{p_2 x_2 x_3}{p_1(p_3 + x_3)} \right) \left( \frac{2p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_3)^2} - \frac{2p_2 p_4 x_2 x_3}{(p_3 + x_3)^3} \right) \\ - u \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_3)} - \frac{p_2 p_4 x_2 x_3}{(p_3 + x_3)^2} \right) \\ - \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_3)} - \frac{p_2 p_4 x_2 x_3}{(p_3 + x_3)^2} \right) \left( u + \frac{p_2 x_2}{p_1(p_3 + x_3)} - \frac{p_2 x_2 x_3}{p_1(p_3 + x_3)^2} \right)$$

Las condiciones de la observabilidad estructural de acuerdo a Lecca y Re (2019) se obtienen a partir de las siguientes relaciones con los menores principales de la matriz JQ:

1.  $|M_1| \geq 1$ .
2.  $\frac{|M_2|}{|M_1|} \geq 1$
3.  $\frac{|M_3|}{|M_2|} \geq 1$

Donde los menores principales para el caso de estudio están dados por:

$$M_1 = [1].$$

$$M_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -u & p_5 + \frac{p_2 p_4 x_3}{(p_3 + x_3)} \end{bmatrix}.$$

$$M_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -u & p_5 + \frac{p_2 p_4 x_3}{(p_3 + x_3)} & \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_3)} - \frac{p_2 p_4 x_2 x_3}{(p_3 + x_3)^2} \\ u^2 & JQ_{32} & JQ_{33} \end{bmatrix}$$

De donde se obtiene,

$$|M_1| = 1$$

$$|M_2| = (1) \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_3}{(p_3 + x_3)} \right) - (0)(-u) = \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_3}{(p_3 + x_3)} \right)$$

El determinante  $|M_3|$  se puede calcular en forma simple por medio de co-factores eligiendo la fila 1 como referencia. Entonces,

$$|M_3| = +1 * \begin{bmatrix} p_5 + \frac{p_2 p_4 x_3}{(p_3 + x_3)} & \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_3)} - \frac{p_2 p_4 x_2 x_3}{(p_3 + x_3)^2} \\ JQ_{32} & JQ_{33} \end{bmatrix}$$

Lo que resulta en la siguiente expresión,

$$|M_3| = \left( p_5 + \frac{p_2 p_4 x_3}{(p_3 + x_3)} \right) (JQ_{33}) - \left( \frac{p_2 p_4 x_2}{(p_3 + x_3)} - \frac{p_2 p_4 x_2 x_3}{(p_3 + x_3)^2} \right) (JQ_{32})$$

La validación de las condiciones de observabilidad arriba mencionadas se pueden establecer al hacer la solución numérica de las mismas resolviendo el modelo del proceso y las condiciones de observabilidad en forma simultánea. El resultado de la matriz de observabilidad es idéntico a la condición que se obtiene para la matriz de observabilidad basada en derivadas de Lie. Entonces, para el caso de la condición de lavado, o que la biomasa sea cero, el sistema es no observable, para valores de biomasa distintos de cero, aun en el caso de consumo de sustrato completo, el sistema es observable.

### *Gramiano Empírico*

El gramiano es una prueba entrada-salida de observabilidad simple que es válida para sistemas lineales. El gramiano empírico es una aproximación numérica entrada-salida usando simulaciones numéricas con el modelo no-lineal alrededor del punto de evaluación de la observabilidad. El procedimiento descrito en el capítulo 2 resulta en un conjunto de simulaciones numéricas a partir de diferentes condiciones iniciales alrededor del punto de evaluación seleccionado.

Considerando el modelo del foto-fermentador para producción de hidrogeno, con  $D=u$ , se tiene,

$$\frac{dS}{dt} = u(S_{in} - S) - \frac{1}{Y_x} \frac{\mu_{max} S}{K_s + S} X \quad (9)$$

$$\frac{dX}{dt} = -uX + \frac{\mu_{max}S}{K_s + S} X \quad (10)$$

$$\frac{dH_2}{dt} = -uH_2 + \frac{1}{Y_x} \phi(I) \frac{\mu_{max}S}{K_s + S} X + \delta X \quad (11)$$

El gramiano empírico se calcula con los programas desarrollados por Christian Himpe (EMGR,2018), y Chuilu Sun y Juergen Hahn (MRR, 2012).

Las matrices de Observabilidad gramiana resultantes son:

$$EMGR = 1e^6 \cdot \begin{bmatrix} 0.7482 & 1.1839 & 0.0021 \\ 1.1839 & 1.8868 & 0.0036 \\ 0.0021 & 0.0036 & 0 \end{bmatrix}, \quad rango = 3$$

$$MRR = 1e^{13} \cdot \begin{bmatrix} 0.5998 & 0.9505 & 0.0020 \\ 0.9505 & 1.5179 & 0.0034 \\ 0.0020 & 0.0034 & 0 \end{bmatrix}, \quad rango = 3$$

Así, los resultados muestran que el foto-fermentador para producción de hidrogeno es completamente observable en una región más amplia que los resultados de la linealización local.

#### 4.2.4 Índice de Observabilidad

El grado de observabilidad se puede cuantificar usando los índices de observabilidad descritos en el marco teórico (Capítulo 2). Para este caso de estudio se hace el análisis del índice de manera dinámica desde  $t_0$  a  $t_f$  usando los índices de observabilidad basados en el número de condición, con base a los valores singulares de la matriz de observabilidad (Whalen y Brennan, 2015), y en los eigenvalores de la matriz de observabilidad normalizada (Nahar et al., 2019).

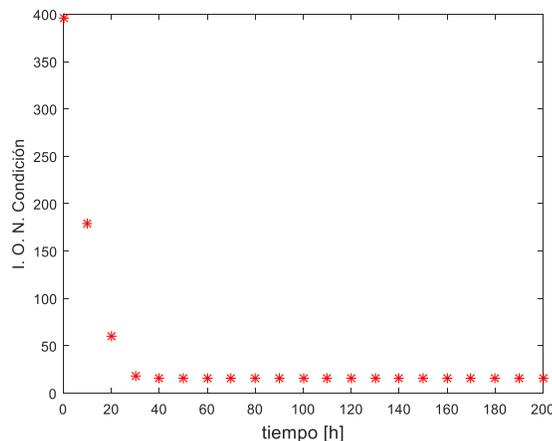


Figura 4.7. Índice de observabilidad dinámico calculado con el número de condición.

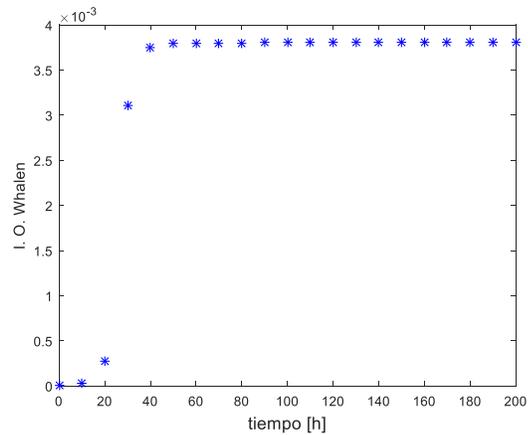


Figura 4.8. Índice de observabilidad dinámico calculado con la propuesta de Whalen y Brennan (2015).

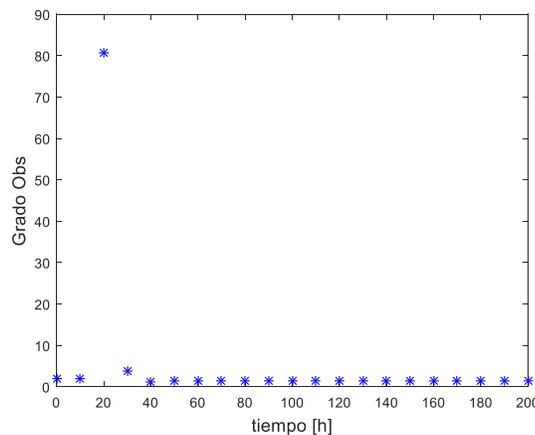


Figura 4.9. Índice de observabilidad dinámico calculado con la propuesta de Nahar et al. (2019).

Las Figuras 4.7 a 4.9 muestran los resultados del índice de observabilidad con las tres propuestas consideradas. En los tres métodos se observa que en la etapa inicial existe un bajo grado de observabilidad, lo cual se puede asociar a bajas concentraciones de la variable medible que no permitirían una estimación precisa de las variables no medibles. Una vez que la variable medible se incrementa y se establece en valores estacionarios, los índices de observabilidad y el grado de observabilidad reflejan buenas propiedades de observabilidad.

### 4.3. Observabilidad de la Digestión Anaerobia de Lactosueros

#### 4.3.1. Mediciones disponibles

En el proceso de digestión anaerobia de lactosueros descrito en el capítulo 3, se consideran siete variables para la descripción y seguimiento del proceso:

- (i) Componentes orgánicos de cadena larga, tales como los carbohidratos, proteínas y lípidos, denotados como  $S_1$ .
- (ii) Componentes orgánicos simples, tales como carbohidratos y aminoácidos, denotados como  $S_2$ .
- (iii) Biomasa hidrolítica,  $X_h$ .
- (iv) Biomasa acidogénicas,  $X_A$ .
- (v) biomasa metanogénica,  $X_m$ .
- (vi) Ácidos grasos volátiles,  $A$ .
- (vii) Metano,  $CH_4$ .

De estas variables, en el trabajo de Arroyo et al. (2020) se reporta la medición de la demanda química de oxígeno, la cual se hace por técnicas estándar (HACH, 2000), de los componentes orgánicos totales ( $S_T$ ) esta se hace por técnicas APHA (2012), los ácidos grasos volátiles ( $A$ ), y el biogás metano ( $CH_4$ ). De estas mediciones, el flujo de biogás metano es fácil, económica y simple por métodos tales como desplazamiento de volumen.

Así, para fines de los análisis de observabilidad se selecciona solo el monitoreo del biogás producido. Entonces, la ecuación de mediciones está dada por,

$$y = CH_4 = Cx = [0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1]x$$

Donde  $x$  es el vector de estados  $x = [x_1 \ x_2 \ x_3 \ x_4 \ x_5 \ x_6 \ x_7] = [X_h \ S_1 \ X_A \ S_2 \ X_m \ A \ CH_4]$ .

#### **4.3.2. Análisis de Observabilidad Convencional: Prueba de Kalman y Criterio de PBH**

Para el análisis por la técnica clásica de Kalman, el rango de la matriz de observabilidad se evalúa a lo largo de la trayectoria de tiempo de la simulación debido a la naturaleza dinámica del caso de estudio. La Figura 4.10 muestra los resultados. Se puede observar que es posible la estimación de todos los estados del modelo a partir de la medición del flujo de gas de metano durante todo el tiempo de operación estudiado.

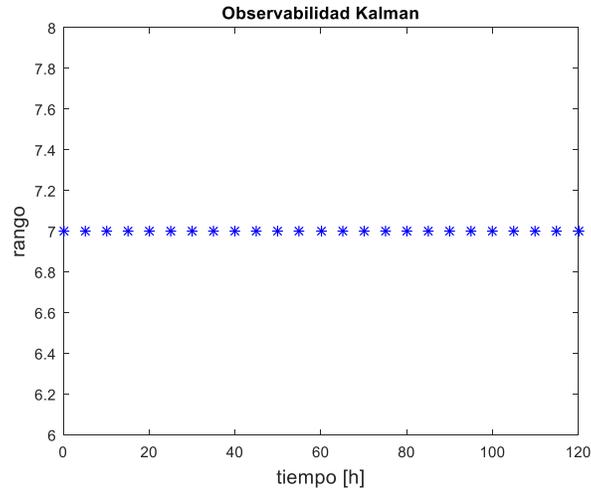


Figura 4.10. Análisis de observabilidad (prueba de Kalman) de la digestión anaerobia de lactosueros con la medición del flujo de gas de metano.

Los resultados del análisis de observabilidad usando el criterio de PBH se muestran en la Figura 4.11.

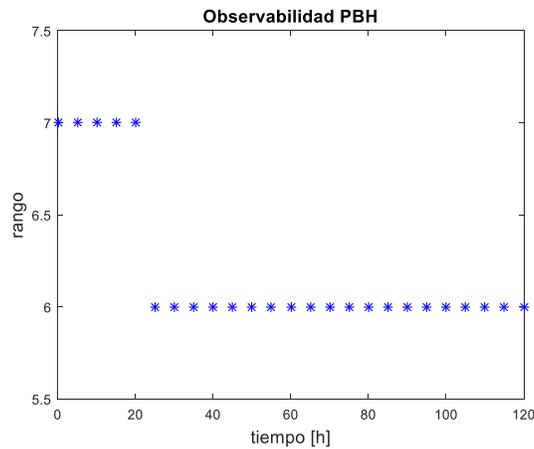


Figura 4.11. Análisis de observabilidad (criterio PBH) de la digestión anaerobia de lactosueros con la medición del flujo de gas de metano.

De los resultados de análisis de rango con esta técnica se puede observar una pérdida de la observabilidad después del tiempo de simulación de 20 unidades de tiempo, que puede asociarse a la matriz linealizada en procesos dinámicos que cambian continuamente sus coeficientes y afectan los eigenvalores que se usan en la evaluación de este criterio.

### 4.3.3. Análisis de Observabilidad No Convencional

*Matriz de observabilidad no-lineal: Linealización con derivadas de Lie*

Debido al alto orden y no-linealidad del modelo, los cálculos de las derivadas de Lie y su evaluación numérica a lo largo de las trayectorias son laboriosas y con alto costo computacional. Los resultados del análisis se presentan así solo en forma matricial como sigue:

$$O = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & J23 & J24 & J25 & J26 & 0 \\ J31 & J32 & J33 & J34 & J35 & J36 & 0 \\ J41 & J42 & J43 & J44 & J45 & J46 & 0 \\ J51 & J52 & J53 & J54 & J55 & J56 & 0 \\ J61 & J62 & J63 & J64 & J65 & J66 & 0 \\ J71 & J72 & J73 & J74 & J75 & J76 & 0 \end{bmatrix}$$

Donde los elementos  $J_{ij}$  denotan los elementos en el renglón  $i$ , columna  $j$ , que no se desvanecen o son distintos de cero. Así, la condición de rango completo se cumple con la medición de CH<sub>4</sub>.

#### *Diagrama de Inferencia*

Aplicando la metodología descrita en el capítulo 2, la Figura 2 muestra el diagrama de inferencia para la digestión de lactosueros. Se puede notar que en el diagrama de incidencia el estado CH<sub>4</sub> es el único nodo raíz SCC, i.e., es decir, que no tiene flechas de entrada. Así, la medición de CH<sub>4</sub> es necesaria para asegurar la observabilidad del proceso.

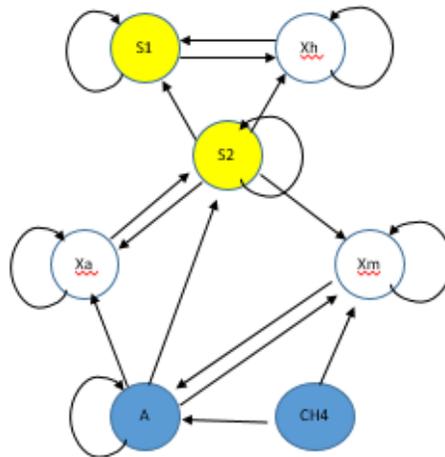


Figura 4.12. Análisis de observabilidad (diagrama de inferencia) de la digestión anaerobia de lactosueros con la medición del flujo de gas de metano.

### 4.3.4 Índice de Observabilidad

El comportamiento del índice de observabilidad, considerando la medición de CH<sub>4</sub>, a lo largo de la trayectoria del modelo del digestor anaerobio durante 120 h, se muestra en la Figura 4.13. Se observa que los valores más bajos del índice de observabilidad se obtienen al inicio de la simulación hasta las 45 h. En 45-100 h, se muestran fluctuaciones considerables, lo que indica propiedades de observabilidad completas deficientes al usar solo la medición de CH<sub>4</sub>.

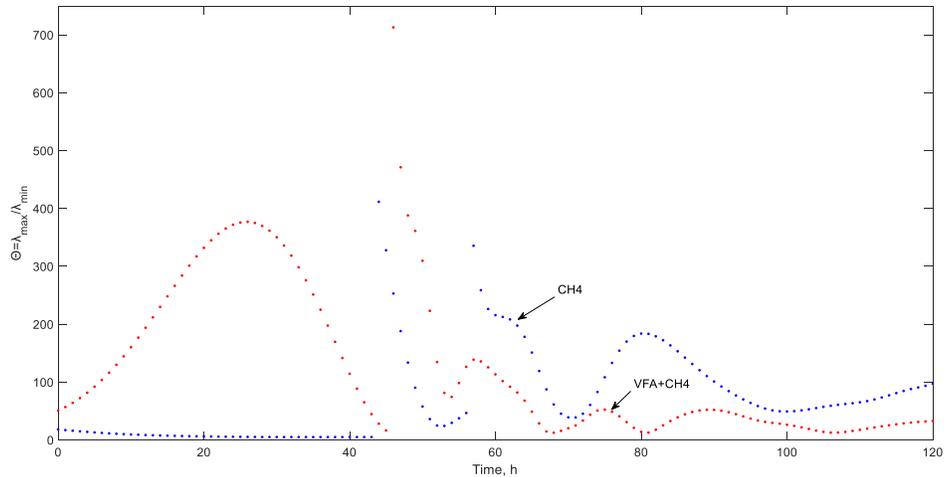


Figura 4.13. Índice de observabilidad dinámico calculado con la propuesta de Nahar et al. (2019).

Para fines de comparación, el índice de observabilidad mediante la medición simultánea de CH<sub>4</sub> y de ácidos grasos volátiles (A) también se presenta en la Figura 4.13. Se puede notar que después de una ligera fluctuación en el intervalo de tiempo de 45-60 h, se mejoran las propiedades de observabilidad. Esto se puede asociar a que la producción de A refleja mejor el estado de la AD en ese intervalo del proceso.

## 4.4. Microalgas

Para el proceso de microalgas de tres estados el desarrollo de sensores ha tenido gran auge, por lo que el monitoreo de biomasa se puede hacer a través de sensores ópticos (Benavides et al 2015).

### 4.4.1. Mediciones disponibles

Para este proceso en especial como se formuló en el capítulo 3 se tienen tres variables de estado:

- i) Biomasa

- ii) Sustrato orgánico en forma de nitrógeno.
- iii) Quota interna de nitrógeno.

En este tipo de procesos la instrumentación en el monitoreo de las variables principales involucradas presenta varias problemáticas, y usualmente no es posible el monitoreo en línea de la concentración de los elementos de interés (Benavides et al., 2015). En trabajos recientes se ha demostrado que la observabilidad se cumple cuando la biomasa es monitoreada, así las otras dos variables de estado involucradas como la concentración extracelular de sustrato y la quota interna de sustrato pueden ser inferidas con el monitoreo de la biomasa. Así se considera la medición de biomasa, como se presenta en el trabajo de Benavides a través de un sensor óptico, la estructura para el vector de mediciones:

$$y = X = Cx = [1 \ 0 \ 0]x$$

Donde  $x$  es el vector de estados  $x = [x_1 \ x_2 \ x_3] = [X \ S \ Q]$ .

#### 4.4.2. Análisis de Observabilidad Convencional: Prueba de Kalman y Criterio de PBH

La observabilidad se evalúa en todo el tiempo de simulación con la finalidad de evaluar posibles regiones de pérdida de observabilidad. La figura siguiente muestra el cálculo de rango de la matriz de observabilidad.

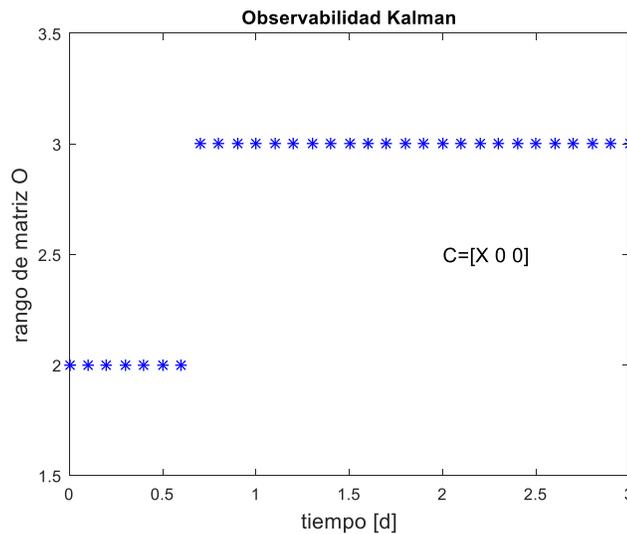


Figura 4.14 Análisis de rango (Kalman) con el monitoreo de la biomasa.

En la figura del análisis de rango se puede observar que en el tiempo inicial de simulación se observa que el sistema es no observable, sin embargo, se puede asociar a los transitorios iniciales por las condiciones iniciales.

Con los resultados de la observabilidad de Kalman se hace el análisis de observabilidad por PBH con el monitoreo de biomasa para hacer un comparativo. Al evaluar el criterio de observabilidad PBH se obtienen los resultados siguientes:

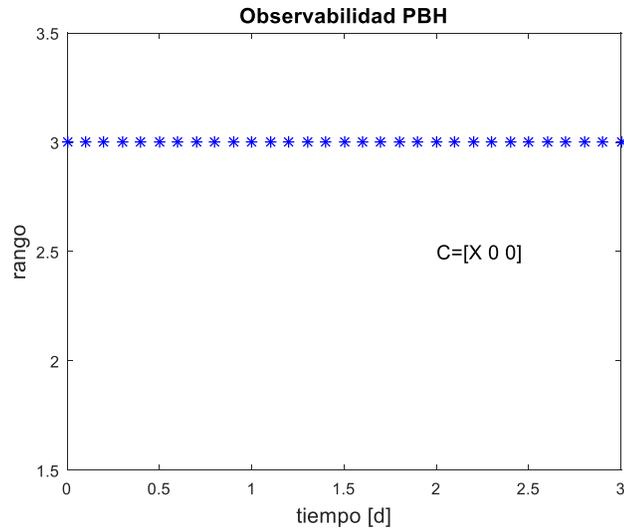


Figura 4.15. Análisis de rango con el monitoreo del hidrógeno.

De los resultados obtenidos se pueden apreciar la coincidencia de los resultados en las dos metodologías.

#### 4.4.3. Análisis de Observabilidad No Convencional

*Matriz de observabilidad no-lineal Observabilidad con derivadas de Lie*

La observabilidad a través de geometría diferencial se evalúa al calcular la matriz de observabilidad dada por la Ec. (2.16). Los resultados de las matrices no se presentan por claridad en la presentación y limitaciones de espacio. La Fig. 4.14 presenta la evaluación del análisis de rango a lo largo del tiempo de simulación.

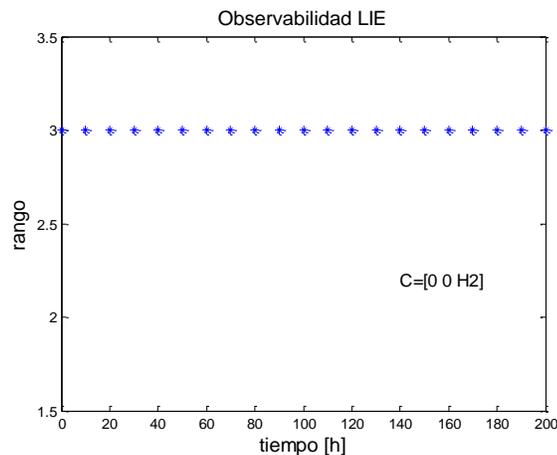


Figura 4.14. Análisis de rango con el monitoreo de la biomasa.

Se puede observar que, en este caso, el rango de observabilidad se mantiene durante todo el tiempo de integración. Es decir, los transitorios iniciales no afectan la propiedad de observabilidad.

#### Diagrama de Inferencia

Para este caso en especial, el sistema de ecuaciones diferenciales que lo representa muestra una dependencia entre cada ecuación sin que ninguna de ellas pueda obtener acceso de información de dos variables, solo de una, esto queda reflejado en el siguiente diagrama.

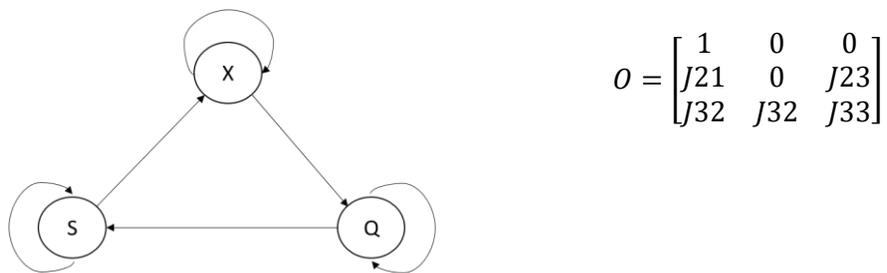


Figura 4.15. Diagrama de inferencia y matriz de observabilidad con derivada de Lie.

En la parte izquierda se observa la codependencia en el modelado de cada una de las variables.

#### 4.4.4 Índice de Observabilidad

Para este caso de estudio se hace el análisis del índice de manera dinámica desde  $t_0$  a  $t_f$  por los métodos propuestos en el marco teórico y los resultados anteriores de observabilidad global, estos resultados gráficos son los siguientes.

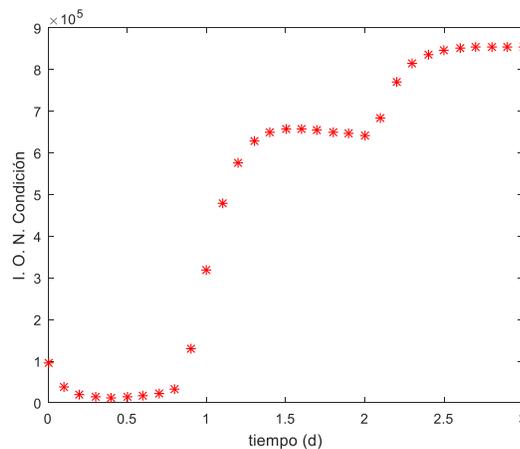


Figura 4.16. Índice de Observabilidad dinámico calculado con número de condición.

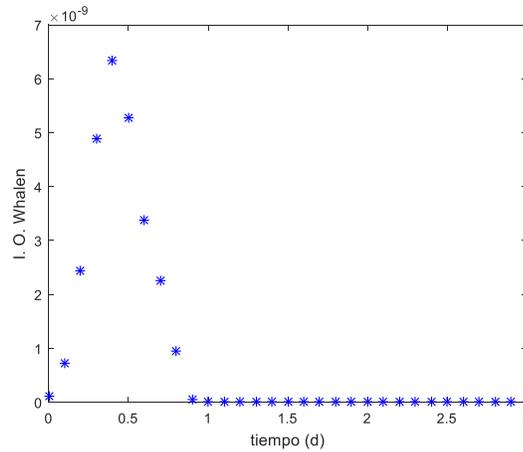


Figura 4.17. Índice de Observabilidad dinámico calculado con propuesta de Whalen et al.

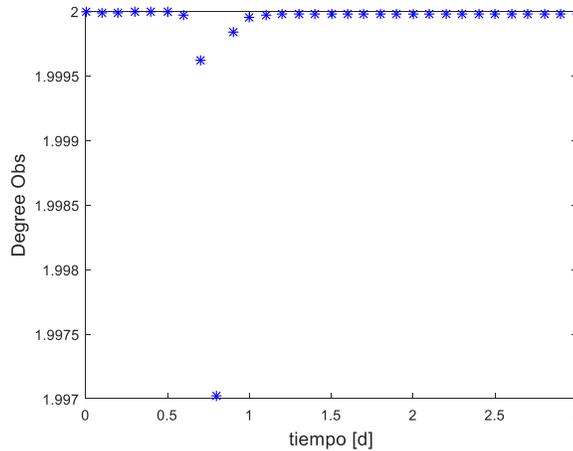


Figura 4.18. Índice de Observabilidad dinámico calculado con propuesta de Nahar et al.

En los resultados gráficos de la dinámica del índice de observabilidad, en los tres métodos se observa que en ciertas regiones pierde o gana observabilidad, esto es característico de este tipo de sistemas en los cuales la no linealidad afecta la dinámica del proceso.

## 4.5. Biodiesel

El proceso de producción de biodiesel requiere mediciones que ayudan a tener un mejor monitoreo y control de las variables del proceso. Estas mediciones poseen información valiosa sobre las condiciones de operación y dan simultáneamente un estimado de variables importantes que no se pueden monitorear en la práctica. Algunas de estas variables no se pueden monitorear en línea, por lo que se tienen que hacer fuera de línea por métodos de cromatografía de gas y de líquidos, métodos de espectroscopia (Richard et al., 2011), entre otros, cabe decir que en algunos se necesita un pretratamiento de la muestra. Los avances en la actualidad en los analizadores de medición de concentraciones

de las variables en línea son muy costosos y difíciles de mantener, por lo tanto, el efecto de una aplicación en línea de un estimador de estado es necesaria para un mejor conocimiento de las variables del proceso, para eliminar el alto costo y carencia de los sensores adecuados (López-Zapata et al., 2017).

Para el proceso de producción de biodiesel, debido a la naturaleza no isotérmica del caso de estudio, se considera el monitoreo de temperatura, la cual es una variable que es rápida, económica y fácil de medir.

#### 4.5.1. Mediciones disponibles

Para este proceso en especial como se formuló en el capítulo 3 se tienen cuatro variables de estado:

- i) Concentración de ácidos grasos libres (A)
- ii) Concentración de esteres orgánicos (E).
- iii) Concentración de agua (W).
- iv) Temperatura del medio de reacción (T).

Así se considera la medición de biomasa, como se presenta en el trabajo de Benavides a través de un sensor óptico, la estructura para el vector de mediciones:

$$y = X = Cx = [1 \ 0 \ 0]x$$

Donde  $x$  es el vector de estados  $x = [x_1 \ x_2 \ x_3] = [X \ S \ Q]$ .

#### 4.5.2. Análisis de Observabilidad Convencional: Prueba de Kalman y Criterio de PBH

##### *Observabilidad de Kalman*

Se considera el monitoreo de la temperatura del proceso para el vector de mediciones  $C$ , es decir  $C = [0 \ 0 \ 0 \ 1]$ . La observabilidad se evalúa en todo el tiempo de simulación con la finalidad de evaluar posibles regiones de pérdida de observabilidad. La Fig. 4.19 muestra el cálculo de rango de la matriz de observabilidad.

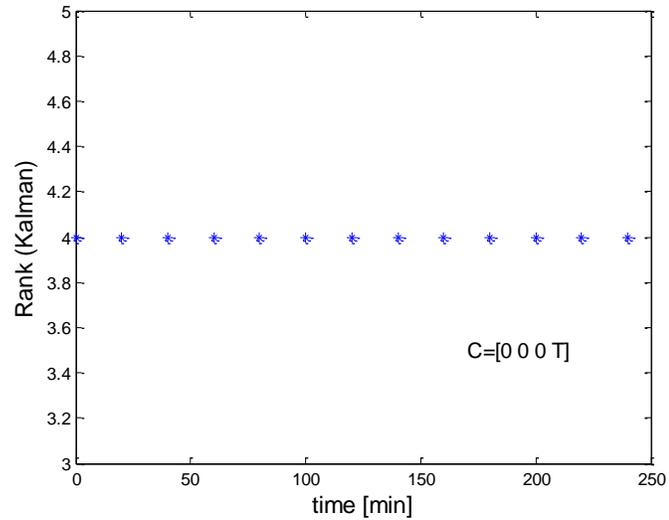


Figura 4.19 Análisis de rango (Kalman) con el monitoreo de la temperatura.

En la figura del análisis de rango se puede observar que con la configuración propuesta se logra alcanzar el rango completo del sistema, para el conocimiento de todos los estados del sistema.

#### *Observabilidad PBH*

Con los resultados de la observabilidad de Kalman se hace un comparativo con el criterio de observabilidad PBH con la medición de la temperatura, los resultados del análisis de rango son los siguientes, Fig. 4.20.

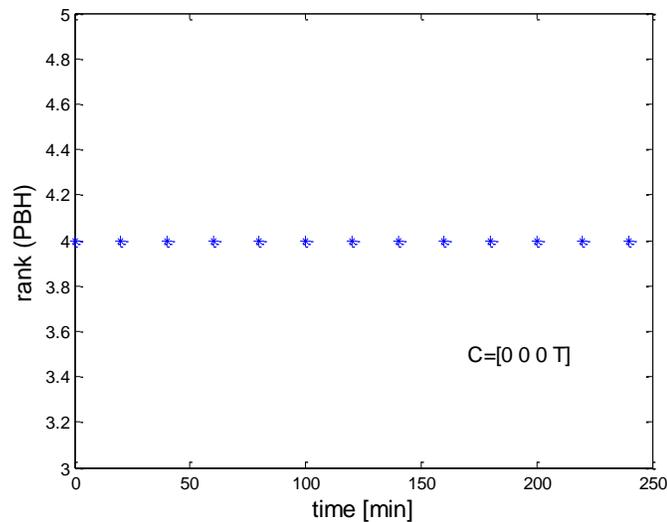


Figura 4.20 Análisis de rango con el monitoreo de la temperatura.

De los resultados obtenidos se pueden apreciar la coincidencia de los resultados en las dos metodologías.

### 4.5.3. Análisis de Observabilidad No Convencional

#### Observabilidad no lineal con derivadas de Lie

La observabilidad a través de geometría diferencial se evalúa al calcular la matriz de observabilidad dada por la ecuación 2.16. Los resultados de las matrices no se presentan por limitaciones de espacio. La Fig.4.21 presenta la evaluación del rango a lo largo del tiempo de simulación.

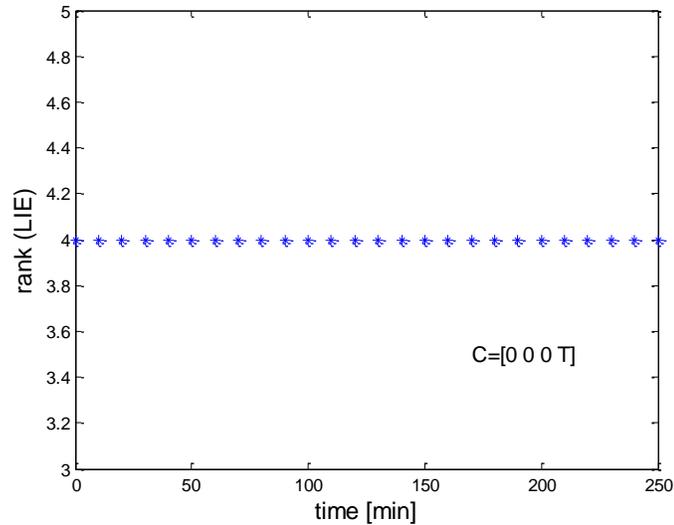
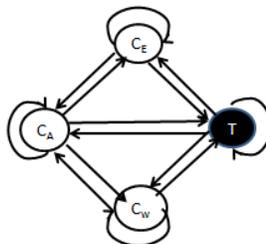


Figura 4.21 Análisis de rango con el monitoreo de la temperatura.

Se puede observar que, en este caso, el rango de observabilidad se mantiene durante todo el tiempo de integración. Es decir, los transitorios iniciales no afectan la propiedad de observabilidad.

#### Diagrama de Inferencia

Para este análisis se considera el monitoreo de la temperatura, a continuación, se presenta el diagrama de inferencia con su respectiva matriz de observabilidad con derivada de Lie.



$$O = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ J_{21} & J_{22} & J_{23} & J_{24} \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} & J_{43} \\ J_{41} & J_{42} & J_{43} & J_{44} \end{bmatrix}$$

Se observa la relación que tiene la temperatura con cada estado del modelo, el recibimiento de información que se presenta en su ecuación se ve reflejado en el diagrama.

#### 4.5.4 Índice de Observabilidad

Para este caso de estudio se hace el análisis del índice de manera dinámica desde  $t_0$  a  $t_f$  por los métodos propuestos en el marco teórico y los resultados anteriores de observabilidad global, estos resultados gráficos son los siguientes.

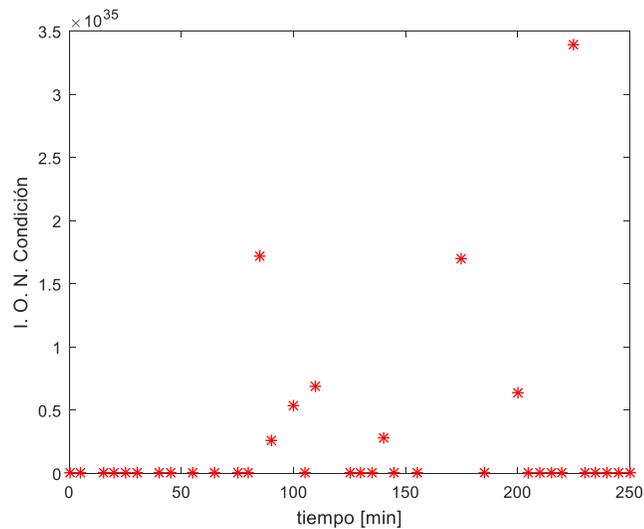


Figura 4.22. Índice de Observabilidad dinámico calculado con número de condición.

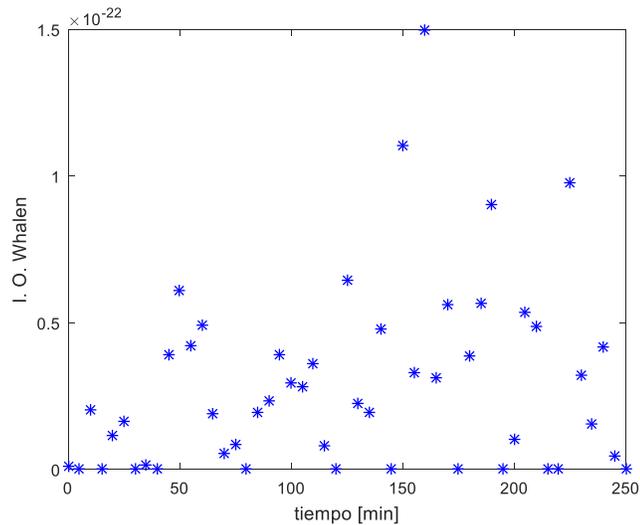


Figura 4.23. Índice de Observabilidad dinámico calculado con propuesta de Whalen et al.

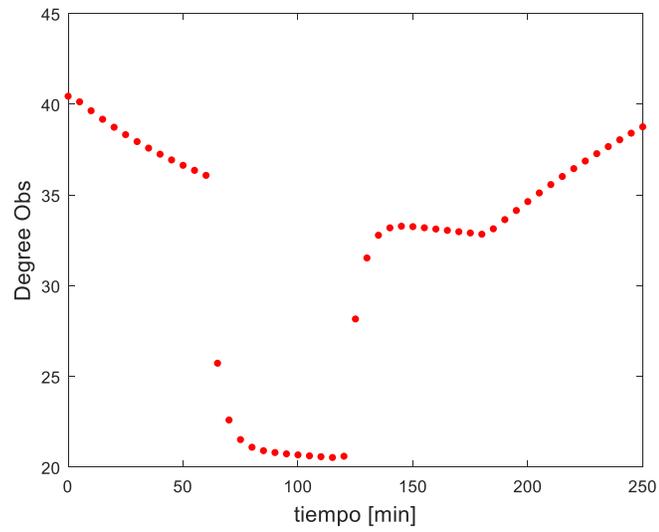


Figura 4.24. Índice de Observabilidad dinámico calculado con propuesta de Nahar et al.

En los resultados gráficos de la dinámica del índice de observabilidad, en los tres métodos se observa que en ciertas regiones pierde o gana observabilidad, esto es característico de este tipo de sistemas en los cuales la no linealidad afecta la dinámica del proceso.

## Capítulo 5

### Observadores

En este Capítulo se presenta el diseño y aplicación de dos observadores de estados para los casos de estudio: el observador de Luenberger extendido, y el observador de modo deslizante de alto orden.

#### 5.1. Estimación de Estados No-Medibles en Foto-fermentación

De acuerdo con las características del foto-fermentador para producción de  $H_2$ , y los resultados del análisis de observabilidad, el diseño de un observador en este caso de estudio se refiere a la estimación de la biomasa y el sustrato a partir de la medición de  $H_2$ .

##### 5.1.1 Estructura general del observador

Considere la estructura del observador descrita en el marco teórico para la estimación de sustrato y biomasa a partir de la medición de hidrógeno,  $y = H_2$ ,

$$\frac{d\tilde{S}}{dt} = D(S_{in} - \tilde{S}) - \frac{1}{Y_x} \frac{\mu_{max}\tilde{S}}{K_s + \tilde{S}} \tilde{X} + Obs \quad \tilde{S}(0) = \tilde{S}_0 \quad (5.1)$$

$$\frac{d\tilde{X}}{dt} = -D\tilde{X} + \frac{\mu_{max}\tilde{S}}{K_s + \tilde{S}} \tilde{X} + Obs \quad \tilde{X}(0) = \tilde{X}_0 \quad (5.2)$$

$$\frac{d\tilde{H}_2}{dt} = -D\tilde{H}_2 + \frac{1}{Y_x} \phi(I) \frac{\mu_{max}\tilde{S}}{K_s + \tilde{S}} \tilde{X} + \delta\tilde{X} + Obs \quad \tilde{H}_2(0) = \tilde{H}_{2_0} \quad (5.3)$$

Donde  $\tilde{S}$ ,  $\tilde{X}$ , y  $\tilde{H}_2$ , corresponden a los estados estimados de sustrato, biomasa e hidrógeno y  $Obs$  es el término correctivo que depende de cada diseño del observador.

##### 5.1.2 Observadores de Luenberger extendido y de modo deslizante de alto orden.

El término correctivo del observador de Luenberger extendido está dado por la expresión siguiente.

$$Obs = L(y - \tilde{H}_2) \quad (5.4)$$

Donde  $L$  es el vector de ganancias que se obtiene por el método de asignación de polos.

El término correctivo del observador de modo deslizante de alto orden es,

$$Obs = K \text{sign}(y - \tilde{H}_2) * \|y - \tilde{H}_2\|^{1/n} \quad (5.5)$$

Donde  $K$  es el vector de ganancias del observador y  $n$  es un numero entero impar. Si bien en la literatura existen algunas propuestas o recomendaciones para la asignación de estos parámetros, no es sencilla su derivación. Así, en este trabajo el sintonizado de los valores del observador de modo deslizante de alto orden se hizo de manera heurística.

### 5.1.3 Implementación y evaluación numérica de los observadores.

Los observadores arriba descritos se programaron en la simulación base del caso de estudio en Matlab® y los parámetros base de los observadores son los siguientes:

- Luenberger extendido:  $L = [0.035 \quad 0.170 \quad 0.742]$ .
- Modo deslizante de alto orden:  $K=0.5$  y  $n=3$ .

Las Figuras 5.1 y 5.2 muestran el desempeño de los observadores de Luenberger extendido y de modo deslizante de alto orden considerando condiciones iniciales idénticas entre el modelo que representa el proceso y el observador.

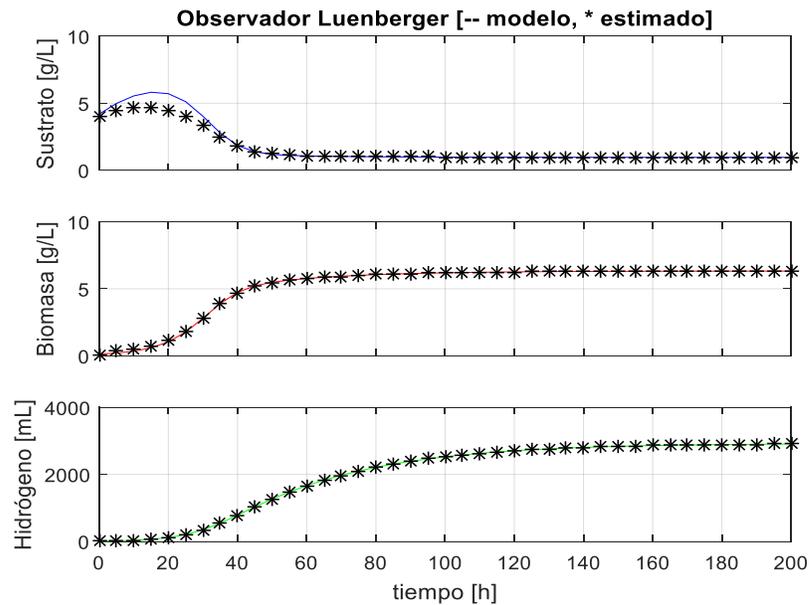


Figura 5.1 Desempeño de observador de Luenberger extendido en el fotofermentador.

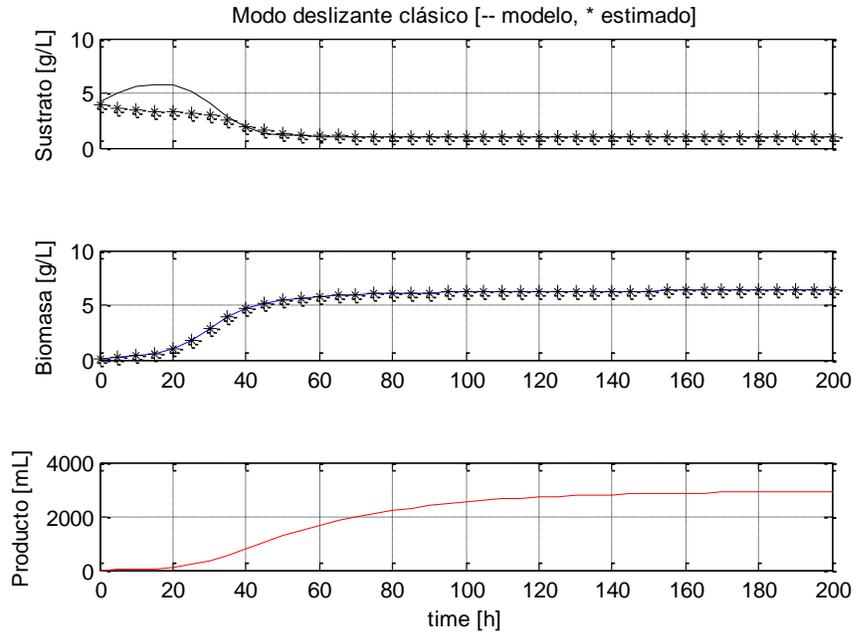


Figura 5.2. Desempeño de observador de modo deslizante de alto orden en el fotofermentador.

Las Figuras 5.1 y 5.2 muestran al inicio un poco de disparidad entre los estados reales y los estimados, lo cual se puede asociar a los transitorias iniciales de la implementación numérica y el grado de observabilidad menor cuando la variable medida se mantiene en valores bajos.

Las Figuras 5.3 y 5.4 muestran el desempeño de los observadores propuestos con una variación del 10% en las condiciones iniciales entre el modelo real y el observador.

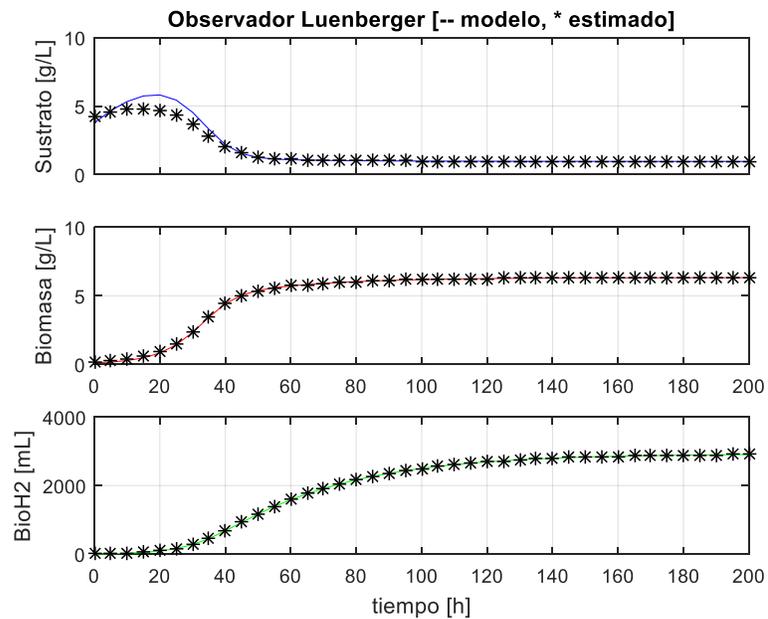


Figura 5.3. Desempeño del observador de Luenberger extendido con variación en las condiciones iniciales.

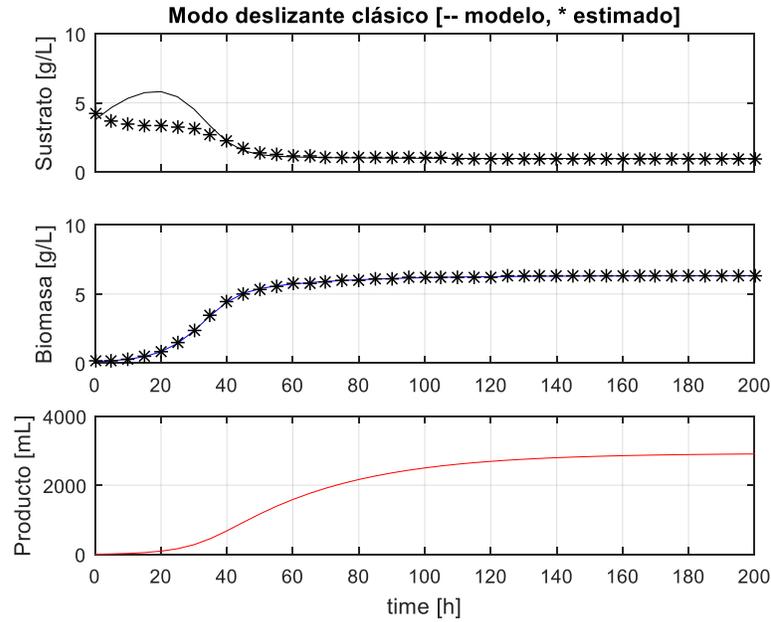


Figura 5.4. Desempeño del observador de modo deslizante de alto orden con variación en las condiciones iniciales.

Los resultados en los dos observadores muestran resultados similares en la estimación de los estados no medibles. Por otro lado, para comparar visualmente el desempeño del observador a cambios en los parámetros cinéticos se realiza una simulación modificando un 20 % la constante de crecimiento y la constante de saturación, esto es,  $\mu_{\max}=0.48$  y  $K_s=12$ , obteniendo la siguiente figura.

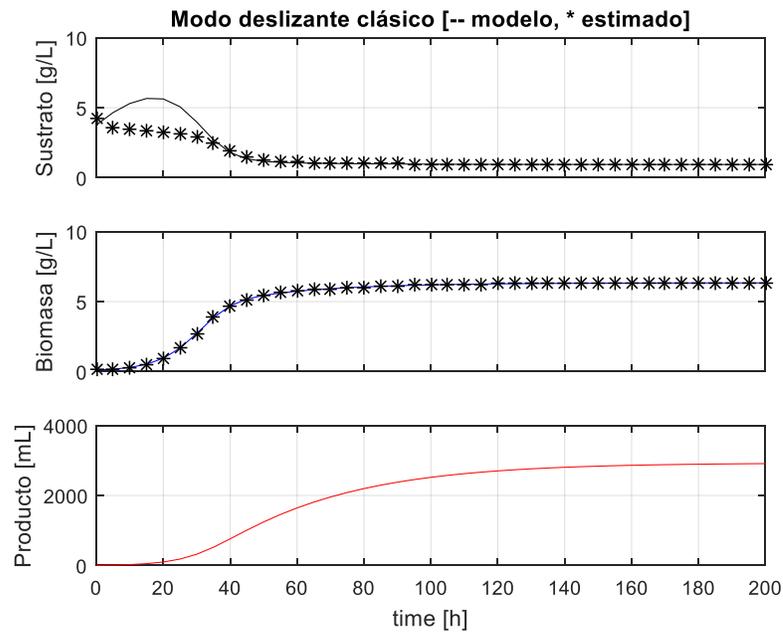


Figura 5.5. Desempeño del observador de modo deslizante con variación en parámetros cinéticos.

Los resultados en los dos observadores no muestran cambios en las trayectorias, por lo que se puede concluir la robustez en el diseño del observador.

## 5.2 Estimación de Estados en la Digestión Anaerobia de Lactosueros

En este caso de estudio se considera la estimación de los estados del modelo semiestructurado presentado en el Capítulo 3 de la digestión anaerobia de lactosueros. De acuerdo con los resultados del análisis de observabilidad, se establece que es posible estimar los estados del modelo a partir de la única medición del flujo de biogás.

Para este caso la implementación de los observadores se hace uso de mediciones experimentales disponibles que se toman del trabajo de Arroyo et al. (2020). La siguiente Figura muestra los datos de mediciones disponibles y las predicciones del modelo presentado en el Capítulo 3.

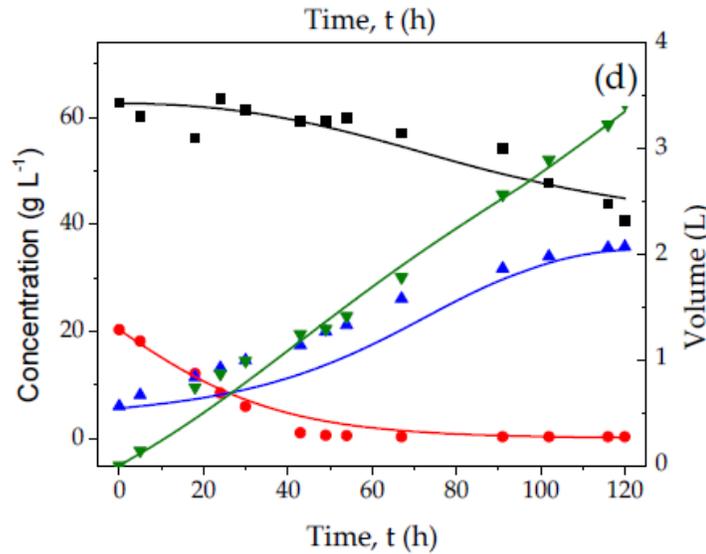


Figura 5.6 Dinámica de variables medibles de la digestión anaerobia de lactosueros ■  $COD_{exp}$ , ●  $S_{1,exp}$ , ▲  $VFA_{exp}$ , ▼ Biogás, a  $pH=7.5$ ,  $T=40^{\circ}C$ . (tomada de Arroyo et al., 2020).

### 5.2.1 Estructura general del observador

La estructura del observador para este caso de estudio, considerando la estimación de los estados del modelo  $X_h, S_1, X_A, S_2, X_m, A$  a partir de la medición del flujo de biogás de metano  $y = CH_4$ , es,

$$\frac{d\tilde{X}_h}{dt} = K_h \tilde{S}_1 \tilde{X}_h - K_{dh} \tilde{X}_h + Obs \quad \tilde{X}_h(0) = \tilde{X}_{h_0} \quad (5.6)$$

$$\frac{d\tilde{S}_1}{dt} = -\frac{1}{Y_{X_h/S_1}} K_h \tilde{S}_1 \tilde{X}_h + Obs \quad \tilde{S}_1(0) = \tilde{S}_{1_0} \quad (5.7)$$

$$\frac{d\tilde{X}_A}{dt} = I \frac{\mu_{maxa}\tilde{S}_2}{K_{S2} + \tilde{S}_2} \tilde{X}_A - K_{da}\tilde{X}_A + Obs \quad \tilde{X}_A(0) = \tilde{X}_{A0} \quad (5.8)$$

$$\frac{d\tilde{S}_2}{dt} = K_h\tilde{S}_1\tilde{X}_h Y_{S2/X_h} - \frac{1}{Y_{X_A/S_2}} I \frac{\mu_{maxa}\tilde{S}_2}{K_{S2} + \tilde{S}_2} \tilde{X}_A + Obs \quad \tilde{S}_2(0) = \tilde{S}_{20} \quad (5.9)$$

$$\frac{d\tilde{X}_m}{dt} = I \frac{\mu_{maxm}\tilde{A}}{K_A + \tilde{A} + \tilde{A}^2/K_I} \tilde{X}_m - K_{dm}\tilde{X}_m + Obs \quad \tilde{X}_m(0) = \tilde{X}_{m0} \quad (5.10)$$

$$\frac{d\tilde{A}}{dt} = Y_{A/X_a} I \frac{\mu_{maxa}\tilde{S}_2}{K_{S2} + \tilde{S}_2} \tilde{X}_A - I \frac{1}{Y_{X_m/A}} \frac{\mu_{maxm}\tilde{A}}{K_A + \tilde{A} + \tilde{A}^2/K_I} \tilde{X}_m + Obs \quad \tilde{A}(0) = \tilde{A}_0 \quad (5.11)$$

$$\frac{d\tilde{C}\tilde{H}_4}{dt} = Y_{CH_4/X_m} I \frac{\mu_{maxm}\tilde{A}}{K_A + \tilde{A} + \tilde{A}^2/K_I} \tilde{X}_m + Obs \quad \tilde{C}\tilde{H}_4(0) = \tilde{C}\tilde{H}_{40} \quad (5.12)$$

Donde  $\tilde{X}_h, \tilde{S}_1, \tilde{X}_A, \tilde{S}_2, \tilde{X}_m, \tilde{A}$ , y  $\tilde{C}\tilde{H}_4$ , corresponden a los estados estimados de biomasa hidrolítica, substratos de cadena larga, biomasa acidogenica, substratos simples, biomasa metanogenica, ácidos grasos volátiles, y metano.

### 5.2.2 Observadores de Luenberger extendido y de modo deslizante de alto orden.

Las formas del término correctivo de los observadores del Luenberger extendido y modo deslizante están dados como sigue:

- Luenberger extendido:

$$Obs = L(y - \tilde{C}\tilde{H}_4) \quad (5.13)$$

- Modo deslizante de alto orden:

$$Obs = K \text{sign}(y - \tilde{C}\tilde{H}_4) * \|y - \tilde{C}\tilde{H}_4\|^{1/n} \quad (5.14)$$

Se debe notar que, en este caso de estudio, los observadores de estados son alimentados de los datos experimentales disponibles del biogás, con interpolación lineal entre cada dato medido.

### 5.2.3 Implementación y evaluación numérica de los observadores.

Los observadores arriba descritos se programaron en Matlab con la condición inicial base de la simulación del modelo, y alimentando las mediciones y su interpolación lineal entre datos como la medición.

Para este caso de estudio, los parámetros base de los observadores se asignaron por el método LMI de acuerdo a Korbicz y Witczak (2007) para el observador de Luenberger extendido y siguiendo la propuesta de Ribelles (2014) para el modo deslizante de alto orden:

- Luenberger extendido:  $L_i = [-8.7088e-12, 1.6970e-10, -1.0120e-6, -9.6452e-6, 6.9229e-6, 0.0008, -0.0028]$ .
- Modo deslizante de alto orden:  $K_i = [-8.7088e-12, 1.6970e-10, -1.0120e-6, -9.6452e-6, 6.9229e-6, -0.0009, 0.0082]$ ,  $n=3$ .

Las Figuras 5.7 y 5.8 muestran el desempeño del observador de Luenberger extendido para estimar los estados no medibles. Se muestra además la comparación de la estimación con los datos experimentales disponibles.

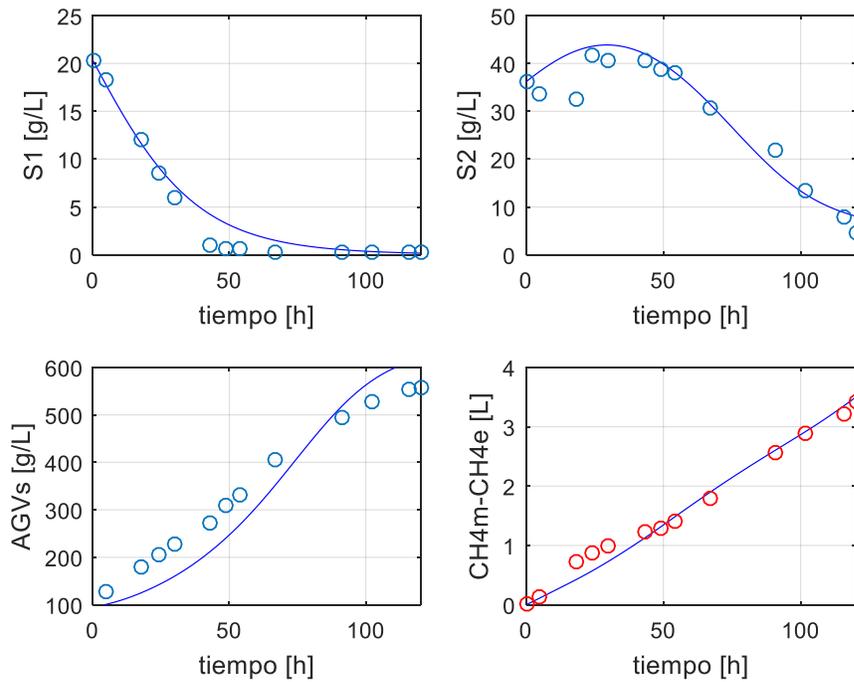


Figura 5.7 Desempeño del observador de Luenberger extendido para la estimación de  $S_1$ ,  $S_2$ , A (AGV), y  $CH_4$ .

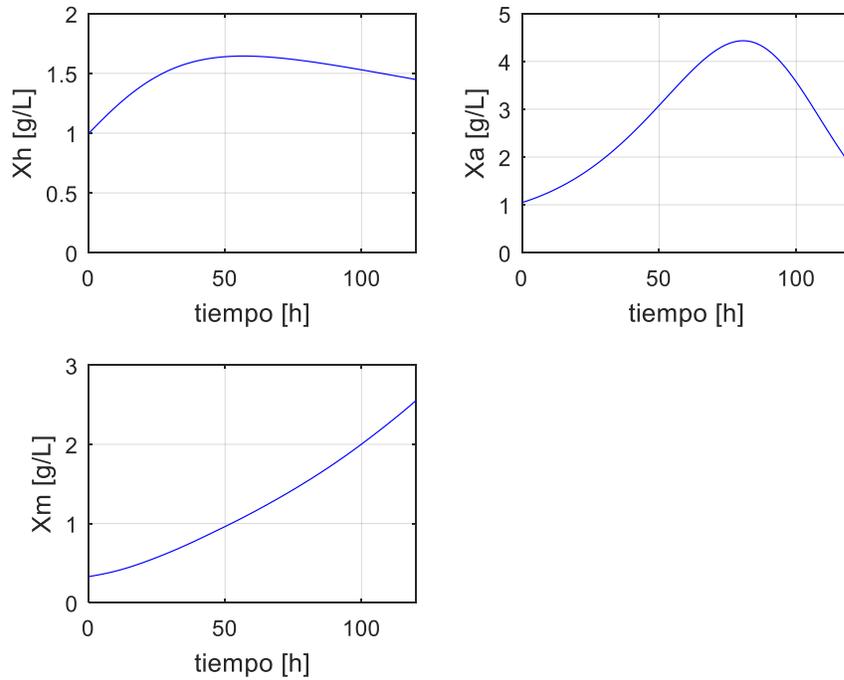


Figura 5.8. Desempeño del observador de Luenberger extendido para la estimación de  $X_H$ ,  $X_A$ , y  $X_M$ .

En las figuras se puede observar que el observador de Luenberger extendido permite una buena estimación de todos los estados a partir de la medición única del biogás.

Las Figuras 5.9 y 5.10 muestran el desempeño del observador de modo deslizante de alto orden para estimar los estados no medibles. Se muestra además la comparación de la estimación con los datos experimentales disponibles.

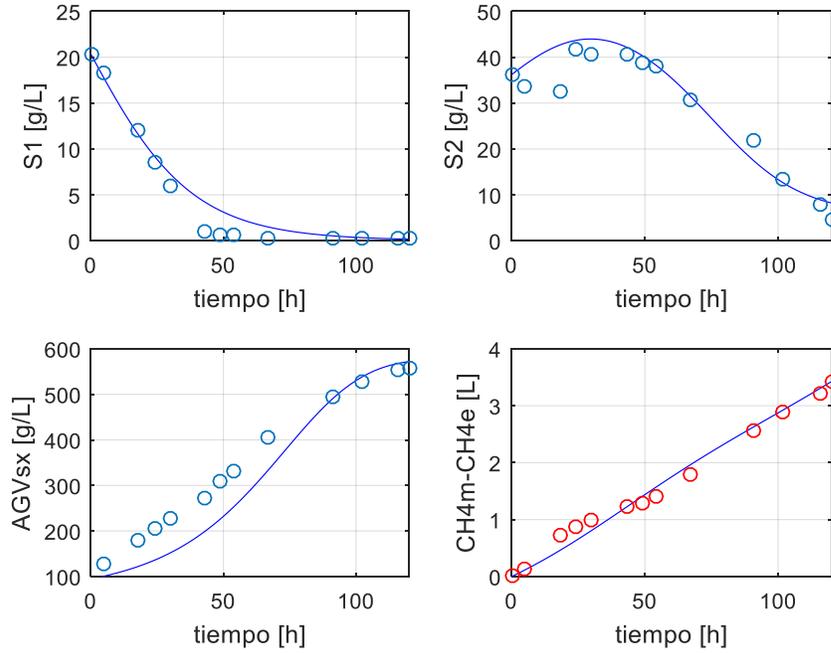


Figura 5.9 Desempeño del observador de modo deslizante de alto orden para la estimación de  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $A$  (AGV), y  $CH_4$ .

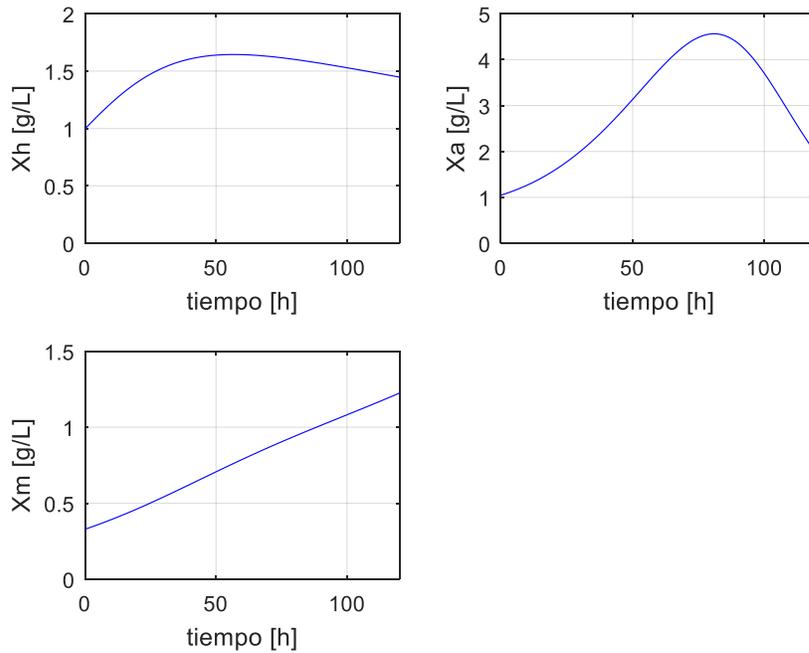


Figura 5.10. Desempeño del observador de modo deslizante de alto orden para la estimación de  $X_H$ ,  $X_A$ , y  $X_M$ .

De los resultados del desempeño del observador de modo deslizante se puede observar la estimación de los estados no medibles en forma similar al observador de

Luenberger, con una mejor estimación del observador del modo deslizante de alto orden para los AGV al final de periodo de implementación.

### 5.3. Estimación de Estados No-Medibles en la Producción de Microalgas

En el caso de estudio de producción de microalgas se considera el modelo simple de Droop que se describe con tres estados: el sustrato, la cuota interna de nutrientes (nutrientes/biomasa), y la biomasa. Para fines de producción de biocombustibles, en particular, el biodiesel, es deseable que se acumulen lípidos en la biomasa bajo limitaciones de nutrientes. Así, este caso de estudio se considera un paso preliminar para mejorar la operación y producción de biodiesel a partir de microalgas, que se considera como la tercera generación.

#### 5.3.1 Estructura general del observador

La estructura del observador considerando la estimación de sustrato y cuota interna a partir de la medición de biomasa  $y = X$  es,

$$\frac{d\tilde{S}}{dt} = D(S_{in} - \tilde{S}) - \frac{\rho_m \tilde{S}}{\tilde{S} + K_s} \tilde{X} + Obs \quad \tilde{S}(0) = \tilde{S}_0 \quad (5.15)$$

$$\frac{d\tilde{Q}}{dt} = \frac{\rho_m \tilde{S}}{\tilde{S} + K_s} - \mu_m \left(1 - \frac{Q_0}{\tilde{Q}}\right) \tilde{Q} + Obs \quad \tilde{Q}(0) = \tilde{Q}_0 \quad (5.16)$$

$$\frac{d\tilde{X}}{dt} = -D\tilde{X} + \mu_m \left(1 - \frac{Q_0}{\tilde{Q}}\right) \tilde{X} + Obs \quad \tilde{X}(0) = \tilde{X}_0 \quad (5.17)$$

Donde  $\tilde{S}$ ,  $\tilde{Q}$ , y  $\tilde{X}$ , corresponden a los estados estimados de sustrato, cuota interna y biomasa.

#### 5.3.2 Observadores de Luenberger extendido y de modo deslizante de alto orden.

Para este caso de estudio, los términos correctivos de los observadores están dados como sigue:

- Luenberger extendido:

$$Obs = L(y - \tilde{X}) \quad (5.18)$$

- Modo deslizante de alto orden:

$$Obs = K \text{sign}(y - \tilde{X}) * \|y - \tilde{X}\|^{1/n} \quad (5.19)$$

Para este caso de estudio el sintonizado del observador de Luenberger extendido se hizo con el método LMI de acuerdo con Korbicz y Witczak (2007), y el de modo deslizante de forma heurística.

### 5.3.3 Implementación y evaluación numérica de los observadores.

La implementación de los observadores consiste en la programación de cada uno de ellos con el modelo que representa el proceso. Los parámetros de los observadores son los siguientes:

- Luenberger extendido:  $L_i=[2.06e5, 2.228, 0.13]$ .
- Modo deslizante de alto orden:  $K=0.05$  y  $n=5$ .

Las Figuras 5.11 y 5.12 muestran el desempeño de los dos observadores considerando condiciones iniciales idénticas entre el modelo que representa el proceso y el observador. Además, en 2 unidades de tiempo se considera un cambio en la dilución de entrada en el modelo que representa el proceso para evaluar la robustez a perturbaciones externas.

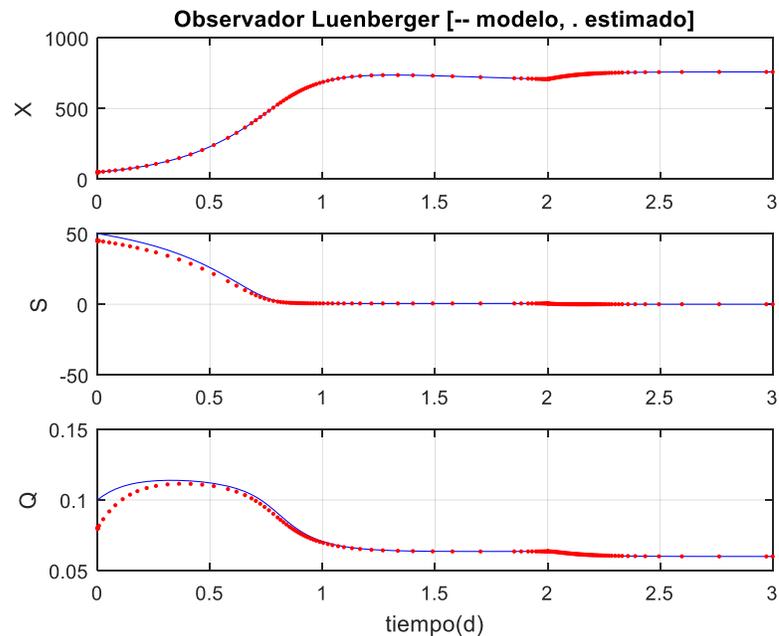


Figura 5.11. Desempeño del observador de Luenberger extendido en la producción de microalgas.

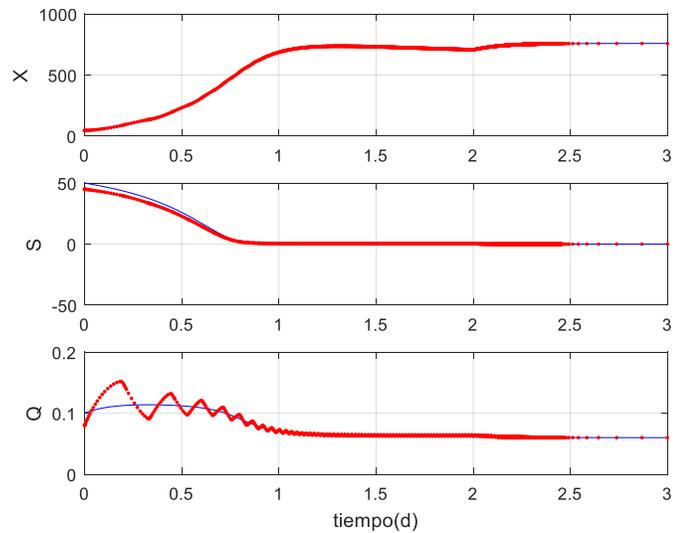


Figura 5.12. Desempeño del observador de modo deslizante de alto orden en la producción de microalgas

Los resultados muestran que los dos observadores presentan diferencias en los instantes iniciales de implementación que corresponden a valores bajos de la variable medida. Por otro lado, el observador de Luenberger extendido presenta una mejor estimación de los estados no medibles. El observador de modo deslizante muestra fluctuaciones durante el periodo inicial asociadas a la naturaleza de la función discontinua y los valores de los parámetros de sintonizado.

Posteriormente se realiza una simulación para comparar el desempeño del observador a cambios en los parámetros cinéticos más sensibles del modelo, modificando la constante de crecimiento  $\mu_{max}=7.71$  a  $\mu_{max}=7.0$  y la constante de saturación  $K_s=10$  a  $K_s=8.5$ , obteniendo la siguiente figura.

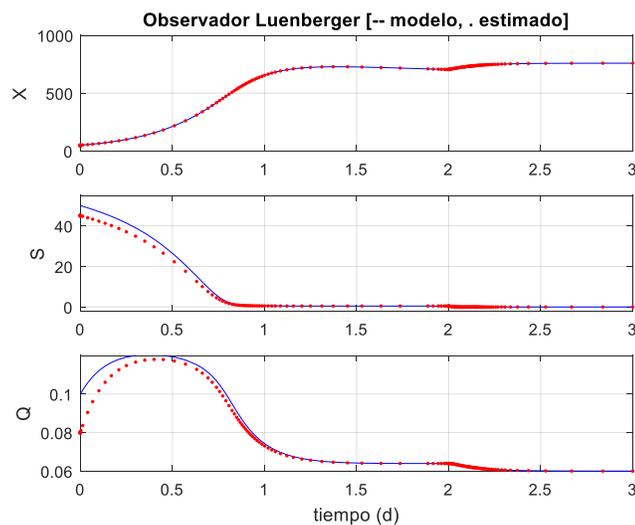


Figura 5.13. Desempeño del observador de modo deslizante con variación en parámetros cinéticos.

Los resultados en los dos observadores no muestran cambios en las trayectorias, por lo que se puede concluir la robustez en el diseño del observador.

## 5.4. Estimación de Estados No-Medibles en la Producción de Biodiesel

El proceso de producción de biodiesel a partir de residuos orgánicos se considera un biocombustible de tercera generación, como el caso de microalgas. La producción de biodiesel por residuos orgánicos se lleva a cabo en reactores no-isotérmicos debido a la liberación de calor de reacción. Los procesos no isotérmicos tienen la ventaja que para una concentración de componente en la mezcla reactante existe una temperatura asociada, de forma que se puede establecer como una medida indirecta de algún componente.

### 5.4.1 Estructura general del observador

La estructura del observador consiste en la estimación de las concentraciones de ácidos grasos libres y esteres orgánicos (biodiesel) principalmente, a partir de la medición de la temperatura  $y = T$ ,

$$\frac{d\tilde{C}_A}{dt} = \frac{F_{FFA}C_{Ai}}{V} - \frac{F\tilde{C}_A}{V} - k_1C_M(0) \left( \tilde{C}_A - \frac{\tilde{C}_E\tilde{C}_W}{K_{eq}C_M(0)} \right) + \text{Obs} \quad \tilde{C}_A(0) = \tilde{C}_{A_0} \quad (5.20)$$

$$\frac{d\tilde{C}_E}{dt} = -\frac{F\tilde{C}_E}{V} + k_1C_M(0) \left( C_A - \frac{\tilde{C}_E\tilde{C}_W}{K_{eq}C_M(0)} \right) + \text{Obs} \quad \tilde{C}_E(0) = \tilde{C}_{E_0} \quad (5.21)$$

$$\frac{d\tilde{C}_W}{dt} = -\frac{F\tilde{C}_W}{V} + k_1C_M(0) \left( C_A - \frac{\tilde{C}_E\tilde{C}_W}{K_{eq}C_M(0)} \right) + \text{Obs} \quad \tilde{C}_W(0) = \tilde{C}_{W_0} \quad (5.22)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{T}}{dt} = & \frac{F_{FFA}\rho_{FFA}\gamma_{FFA}}{\rho V \gamma_P} (T_{AG} - \tilde{T}) + \frac{F_{Mix}\rho_{Mix}\gamma_{Mix}}{\rho V \gamma_P} (T_{Mix} - \tilde{T}) + \frac{U}{\rho V \gamma_P} (T_j - \tilde{T}) \\ & - \frac{\Delta H}{\rho \gamma_P} k_1 C_M(0) \left( \tilde{C}_A - \frac{\tilde{C}_E\tilde{C}_W}{K_{eq}C_M(0)} \right) + \text{Obs} \quad \tilde{T}(0) = \tilde{T}_0 \quad (5.23) \end{aligned}$$

Donde  $\tilde{C}_A$ ,  $\tilde{C}_E$ ,  $\tilde{C}_W$  y  $\tilde{T}$ , corresponden a los estados estimados de ácidos grasos libres, biodiesel, agua, y temperatura.

### 5.3.2 Observadores de Luenberger extendido y de modo deslizante de alto orden.

Para este caso de estudio, los términos correctivos de los observadores están dados como sigue:

- Luenberger extendido:

$$Obs = L(y - \tilde{T}) \quad (5.18)$$

- Modo deslizante de alto orden:

$$Obs = Ksign(y - \tilde{T}) * \|y - \tilde{T}\|^{1/n} \quad (5.19)$$

El sintonizado del observador de Luenberger extendido se hizo con el método de colocación de polos y el de modo deslizante de forma heurística.

### 5.3.3 Implementación y evaluación numérica de los observadores.

Los observadores se programaron en Matlab en la simulación base del modelo de producción de Biodiesel que representa el proceso real. Los parámetros base de los observadores con los métodos descritos antes son los siguientes:

- Luenberger extendido:  $Li=[0.0005, 0.026, 0.03, 0.05]$ .
- Modo deslizante de alto orden:  $K=0.002, n=3$ .

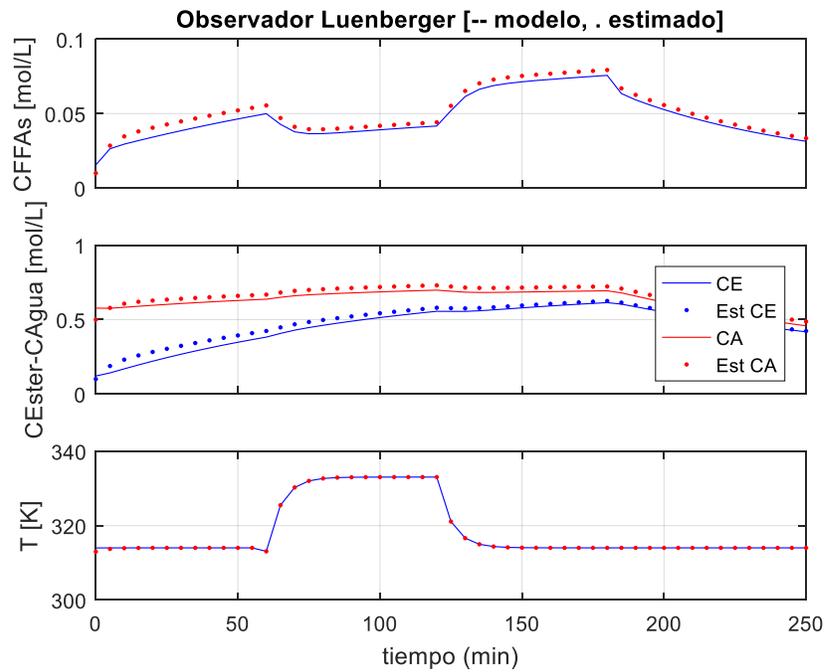


Figura 5.14 Desempeño del observador de Luenberger extendido en la producción de biodiesel.

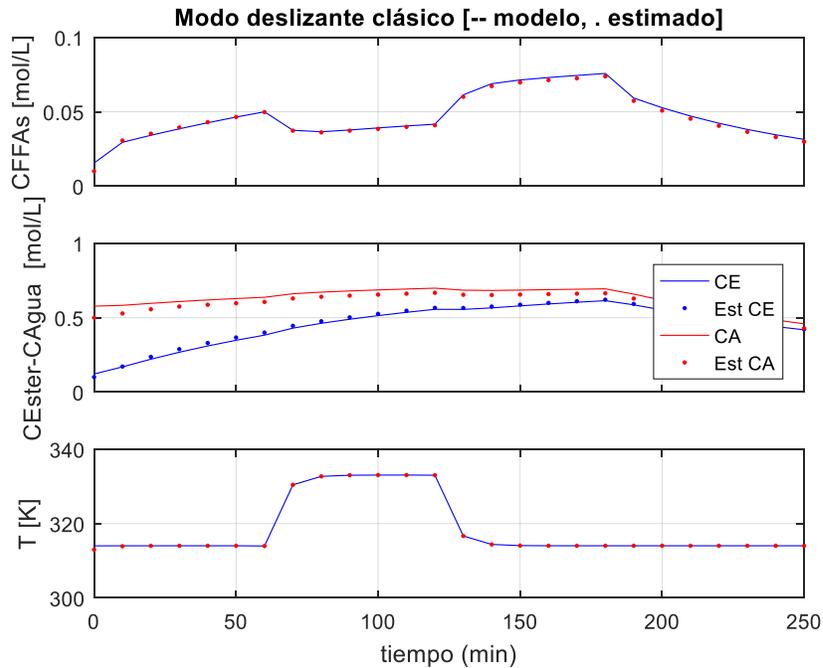


Figura 5.15 Desempeño del observador de modo deslizante de alto orden en la producción de biodiesel.

Las Figuras 5.14 y 5.15 presentan los resultados de la estimación de estados con los observadores de Luenberger extendido y de modo deslizante de alto orden respectivamente. Se puede observar de los resultados que el observador de modo deslizante de alto orden muestra un mejor desempeño para la estimación de los ácidos grasos volátiles y el biodiesel. El observador de Luenberger extendido muestra además una ligera desviación de estimación para la estimación de los ácidos grasos volátiles, lo cual se puede asociar al sintonizado.

Para evaluar la robustez de los observadores propuestos se realiza una simulación para comparar el desempeño del observador a cambios en las condiciones iniciales originales del modelo, modificando las condiciones iniciales un 10%, a excepción de la ecuación de la temperatura, teniendo éstas como  $C_i = [0.013, 0.1, 0.5, 313]$ , obteniendo la siguiente figura.

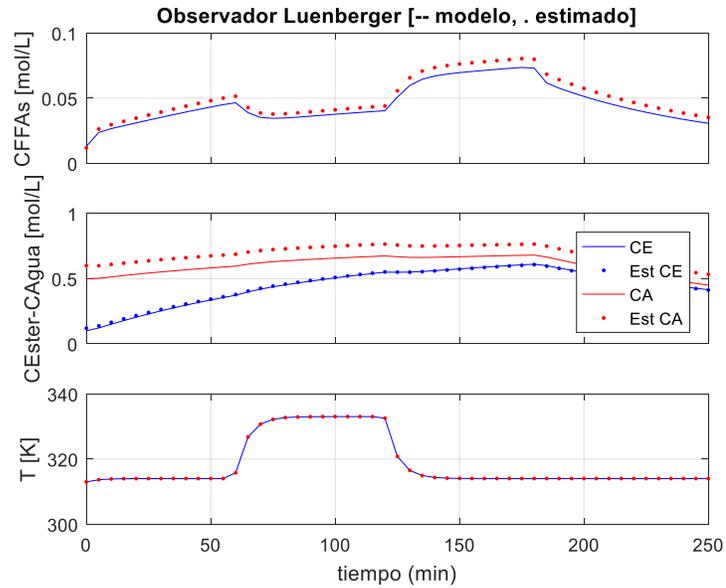


Figura 5.16. Desempeño del observador de Luenberger con variación condiciones iniciales.

Los resultados en los dos observadores no muestran cambios en las trayectorias, por lo que se puede concluir la robustez en el diseño del observador de Luenberger extendido, se puede notar que el observador muestra un buen desempeño cuando se somete a los cambios descritos para evaluar su robustez a perturbaciones externas.

## Capítulo 6

### Conclusiones y recomendaciones

En este capítulo se presentan un panorama general del alcance de este trabajo de investigación, las contribuciones principales, así como una perspectiva de líneas de investigación abiertas que se pueden abordar.

#### 6.1. Panorama general

- **Relevancia de la aplicación:** La producción de biocombustibles es una alternativa de producción de energías renovables que ofrece ventajas desde el punto de vista de reducción de emisión de contaminantes y sustentabilidad respecto a los combustibles tradicionales. Sin embargo, las bajas productividades y altos costos de estos son un problema que atender. Con la finalidad de mejorar la operación de esta clase de procesos es necesario hacer un diagnóstico apropiado para identificar problemas operacionales, así como el control del proceso en condiciones de operación deseadas. El monitoreo de esta clase de proceso es así fundamental para fines de diagnóstico y control.
- **Monitoreo de bioprocesos:** La naturaleza de los bioprocesos es la existencia de muchas especies involucradas con múltiples interacciones entre ellas. Muchos de los componentes involucrados no se pueden medir directamente en forma práctica en términos de altos costos de los equipos de medición, tiempo de medición, o ausencia de sensores específicos. Más aun, la medición de variables a nivel industrial se reduce a variables tales como pH, presión, temperatura, y flujos. Finalmente, en bioprocesos, es común para fines de modelado y monitoreo agrupar especies en una sola clase para facilitar su seguimiento, tales como la demanda química de oxígeno para la carga orgánica asociada a procesar, o la biomasa general que se genera en un consorcio del proceso.
- **Monitoreo indirecto basado en modelo:** Para fines de monitoreo indirecto de procesos a nivel industrial las técnicas basadas en modelo, tales como los observadores de estados, tienen como característica explotar las propiedades del modelo del proceso y conducen a resultados más intuitivos que las técnicas basadas en datos históricos

disponibles. Sin embargo, para fines del diseño de observadores se debe establecer con claridad la posibilidad de poder inferir las variables no medibles a partir de las mediciones disponibles (propiedad de observabilidad), y el efecto de cambios en condiciones de operación (grado de observabilidad).

- En esta tesis se ha estudiado de manera sistemática la estimación de estados no medibles en bioprocesos para la producción de biocombustibles usando un enfoque basado en modelo. Primero se estableció el problema de estimación de estados en esta clase de bioprocesos considerando cuatro casos de estudio. Posteriormente se presenta el marco teórico para establecer la propiedad de observabilidad, el grado de observabilidad, y el diseño de observadores. Finalmente, se aplica la metodología para cada caso de estudio y se discuten sus resultados.

## 6.2 Contribuciones principales

En esta tesis, hasta el mejor conocimiento del autor, se han realizado las siguientes contribuciones al conocimiento científico para el monitoreo indirecto de bioprocesos usando observadores de estados:

- Monitoreo indirecto en bioprocesos: Se extiende el análisis de observabilidad y la aplicación de técnicas basadas en observadores de estados para la estimación de estados no medibles en cuatro procesos de producción de biocombustibles, incluyendo un caso con validación experimental.
- Análisis detallado de observabilidad en bioprocesos: Se establece la propiedad de observabilidad y el grado de observabilidad en una clase de bioprocesos usando herramientas convencionales y no convencionales en ingeniería de procesos.
- Estudio sistemático: Se establece un estudio sistemático de la estimación de estados no medibles usando observadores que consiste en cuatro pasos principales:
  - (i) Identificar la o las variables medibles de cada caso de estudio.
  - (ii) Realizar el estudio de observabilidad de acuerdo con las características del proceso. En el caso de procesos con modelos de orden bajo y sencillos se sugiere aplicar el diagrama de inferencia y evaluar el rango de la matriz de observabilidad por derivadas de Lie. En el caso de procesos con modelos

complejos y de alto orden se sugiere aplicar la condición de rango de Kalman y el gramiano empírico.

- (iii) Evaluar el grado de observabilidad en diferentes regiones de operación para un mejor entendimiento de la convergencia o degradación de los observadores a implementar.
- (iv) Diseñar e implementar observadores simples, tales como el observador de Luenberger extendido o el de modo deslizante de alto orden, considerando los resultados de los pasos previos para la selección de la o las variables medibles.

### **6.3 Líneas de investigación abiertas**

Con base a los resultados que se obtienen en este trabajo, así como de la metodología de estimación de estados no medibles en una clase de bioprocesos, se detectan varias líneas de investigación abiertas, las cuales se identifican como sigue:

- Extender los resultados reportados de este trabajo en más aplicaciones de producción de biocombustibles u otra clase de bioprocesos.
- Establecer las mediciones mínimas disponibles para estimar componentes o metabolitos intermedios en consorcios microbianos para mejorar su entendimiento y modelado.
- Investigar diferentes tipos de observadores presentes en la literatura, para conocer su desempeño en estos bioprocesos y desarrollar sistemas híbridos de observadores.
- Extender el análisis de observabilidad a problemas de ingeniería de procesos, tales como análisis de sensibilidad, colocación de sensores, y detección de fallas.
- Estudiar el problema de control basado en observadores y su desempeño considerando estudios de observabilidad.

Finalmente, se espera que los resultados de este trabajo de investigación estimulen la estimación de estados no medibles en bioprocesos usando la metodología establecida.

## Bibliografía

Agarwal, R., Mahanty, B., Venkata, V. (2009). Modeling Growth of *Cellulomonas cellulans* NRRL B 4567 under Substrate Inhibition During Cellulase Production. Chem. Biochem. Eng. Q. 23 (2) 213–218.

Aguilar, R., Martínez, R.G., Poznyak, A. (2004). A new robust sliding-mode observer design for monitoring in chemical reactors. Journal of Dynamic Systems, Measurement and Control. vol 126, 473-478.

Aguilar, R., Maya, R. (2005). State estimation for nonlinear systems under model uncertainties: a class of sliding-mode observers. Journal of Process Control 15, 363–370.

Aguilar-Garnica E., García-Sandoval J. P. and Dochain D., (2016). Monitoring of a biodiesel production process via reset observer. Journal of Process Control. 42: 104-113.

Aguilar-Garnica E., Rodríguez-Palomera F., García-Sandoval J. P. and Escalante F. M., (2014). Dynamical modeling for biodiesel production from grease trapwastes. Chem. Eng. Sci. 117: 396–406.

Aguirre L. A., (1995). Controllability and Observability of Linear Systems: Some Noninvariant Aspects. IEEE Trans. Ed. 38, 33.

Aiba, S., Shoda, M., Nagatani, M. (1968). Kinetics of product inhibition in alcohol fermentation. Biotechnol. Bioeng. 10, 845.

Al Seadi T., Rutz D., Janssen R. and Drosig B., (2013). Biomass resources for biogas production. The biogas Handbook 19-51.

Alcaraz-Gonzalez, V., Harmand, J., Rapaport, A., Steyer, J.P., Gonzalez-Alvarez, V., & Pelayo-Ortiz, C. (2005). Robust interval-based regulation for anaerobic digestion processes. Water Science and Technology 52, pp. 449-456.

Alcaraz-González, V., Harmand, J., Rapaport, A., Steyer, J.P., Gonzalez-Alvarez, V., & Pelayo-Ortiz, C. (2002). Software sensors for highly uncertain WWTPs: a new approach based on interval observers. Water research, 36(10), 2515-2524.

Ali J., Hoang N., Hussain M. and Dochain D., (2015). Review and classification of recent observers applied in chemical process systems. Computers & Chemical Engineering. 76, 8. 27-41.

American Public Health Association; AmericanWaterWorks Association; Water Pollution Control Federation. Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater; American Public Health Association: Washington, DC, USA, 2012.

Andrews, J., (1968). A mathematical model for the continuous culture of microorganisms utilizing inhibitory substrates, Biotechnol. Bioeng. 10, 707.

Appels, L.; Baeyens, J.; Degrève, J.; Dewil, R. (2008). Principles and potential of the anaerobic digestion of waste-activated sludge. *Prog. Energy Combust. Sci.* 34, 755–781.

Arimi, M. M., Knodel, J., Kiprop, A., Namango, S. S., Zhang, Y., & Geißen, S. U. (2015). Strategies for improvement of biohydrogen production from organic-rich wastewater: a review. *Biomass and bioenergy*, 75, 101-118.

Arroyo C., Lara A., Alvarez E., Trejo G., Bastidas J. and Hernandez E. (2020). An unstructured model for anaerobic treatment of raw cheese whey for volatile fatty acids production. *ENERGIES* 13, 1850.

Arthur N. Montanari and Luis A. Aguirre, (2020). Observability of Network Systems: A Critical Review of Recent Results. *Journal of Control, Automation and Electrical Systems*. 31:1348–1374.

Bailey, J.E., & Ollis, D.F. (1987). *Biochemical Engineering Fundamentals*. McGraw Hill, Inc., New York.

Barragan O. A., Silva B. P., Olmos P. S. and Polanco O. M., (2020). Biotechnology and bioprocesses: Their contribution to sustainability. *Processes* 8, 436.

Bastidas-Oyanedel, J.R., Bonk, F., Thomsen, M. H., & Schmidt, J. E. (2015). Dark fermentation biorefinery in the present and future (bio) chemical industry. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*, 14(3), 473-498.

Bastin, G. (2013). *On-line estimation and adaptive control of bioreactors*. (Vol. 1). Elsevier.

Benavides M., Mailier J., Hantson A., Muñoz G., Vargas A., Impe J. and Wouwer A., (2015). Design and test of a low cost RGB sensor for online measurement of microalgae concentration within a photo-bioreactor. *Sensors*, 15, 4766-4780.

Bequette W., (2003). *Process control, modelling, design and simulation*. Prentice Hall, international series in the Physical and chemical engineering sciences.

Bernard O., (2011). Hurdles and challenges for modelling and control of microalgae for CO<sub>2</sub> mitigation and biofuel production. *J. Process Control* 21 (10) 1378–1389.

Bernard, O., Gouzé, J. (2001). *State estimation for bioprocesses*. Lectures given at the summer school on mathematical control theory, Comore-Francia.

Besançon, G., (2013). *Nonlinear Observers and Applications*. Springer: Berling/Heidelberg, Germany, pp. 1–33.

Bogaerts and Wouwer V. (2003). Software sensors for bioprocesses. *Isa Transactions*. V-42-4, 547-558.

Brammer K. and Siffing G., (1989). *Kalman-Bucy filters*. (Artech House, Inc.).

Bunciu Elena M., (2011). Biomass Estimation for an Anaerobic Bioprocess Using Interval Observer. *Intelligent Decision Technologies, SIST 10*, 95–102.

Callier F. M. and Desoer C. A., (2012). *Linear System Theory*. London, Springer.

Canakci M. and Van Gerpen J., (2001). Biodiesel production from oils and fats with high free fatty acids, *Trans. ASAE 44 (6)*: 1429–1436.

Canakci, M., and J. Van Gerpen. (2001). A pilot plant to produce biodiesel from high free fatty acid feedstocks. ASAE Paper No. 01–6049. St. Joseph, Mich.: ASAE.

Cedeño, C.M. (1995). Tequila production. *Crit. Rev. Biotechnol. 15*, 1-11.

Chaib Draa K., Zemouche A., Alma M., Voos H. and Darouach M., (2018). A discrete-time nonlinear state observer for the anaerobic digestion process. *International Journal of Robust and Nonlinear control. 29:5*, 1279-1301.

Chang JS, Lee KS, Lin PJ. Biohydrogen production with fixedbed bioreactors. *Int J Hydrogen Energy 2002;27:1167e74*.

Chen, C.T.; Chen, C.T. *Linear System Theory and Design*; Holt, Rinehart and Winston: New York, NY, USA, 1984.

Chong M., Sabaratham V., Shirai Y. and Hassan M., (2009). Biodydrogen production from biomass and industrial waste by dark fermentation. *International Journal of Hydrogen Energy 34*, 3277-3287.

Darvehei P., Bahri P. and Moheimani N., (2018). Model development for the growth of microalgae: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews. 97*: 233-258.

Datta A. K. and Sablani S., (2006). Mathematical modelling techniques in food and bioprocesses: An overview. *Handbook of Food and Bioprocess modeling techniques*.

Demirbas, A. (2003). Biodiesel Fuels from Vegetable Oils via Catalytic and Non-Catalytic Supercritical Alcohol Transesterifications and Other Methods: A Survey. *Energy Conversion and Management, 44*, 2093-2109.

Demirbas, A. (2009) Progress and Recent Trends in Biodiesel Fuels. *Energy Conversion and Management, 50*, 14-34.

Dewasme, L.; Sbarciog, M.; Rocha-Cózatl, E.; Haugen, F.; Wouwer, A.V., (2019). State and unknown input estimation of an anaerobic digestion reactor with experimental validation. *Cont. Eng. Pract. 85*, 280–289.

Didi I., Dib H. and Cherki B., (2014). An invariant observer for a chemostat model. *Automatica. 50*, 2321-2326.

Dochain, D. (2003). State and parameter estimation in chemical and biochemical processes: a tutorial. *Journal of process control, 13(8)*, 801-818.

Doran, M.P. (1995). *Bioprocess Engineering Principles*. Academic Press Limited, San Diego, C.A.

Droop M., (1968). Vitamin B12 and marine ecology. iv. The kinetics of uptake, growth and inhibition in *Monochrysis lutheri*, *J. Mar. Biol. Assoc. U. K.* 48 (3) 689–733.

Droop M., (1983). 25 Years of algal growth kinetics: a personal view, *Bot. Mar.* 26 (3) 99–112.

Duan Z. and Kravaris C., (2020). Nonlinear Observer design for two-time-scales systems. *Process Systems Engineering. AIChE Journal* 66(6).

Eriksen N. T. (2008). The technology of microalgal culturing. *Biotechnol Lett* 30:1525–1536

Floquet T. and Barbot J., (2007). Super twisting algorithm based step-by-step sliding mode observers for nonlinear systems with unknown inputs. *International Journal of Systems Science.* 38:10, 803-815.

Friedland B., Controllability Index Based on Conditioning Issue. *J. Dyn. Syst., Meas., Control* 97, 444 (1975).

Fujisawa T., Kuh E., (1971). Some results on existence and uniqueness of solutions of nonlinear networks. *IEEE Trans. Circuit Theory* 18 (5) 501–506.

Gadonneix P., de Castro F. B., de Medeiros N. F., (2010). *Biofuels: Policies, Standards and Technologies*. World Energy Council, London.

Ghimire A., Frunzo L., Pirozzi F., Trably E., Escudie R., Lens P. and Esposito G., (2015). A review on dark fermentative biohydrogen production from organic biomass: Process parameters an use of by-products. *Applied Energy*, 144. 73-95

Golabgir, A., Hoch, T., Zhariy, M. and Herwig, C. (2015). Observability Analysis of Biochemical Process Models as a Valuable Tool for the Development of Mechanistic Soft Sensors. *AIChE* DOI 10.1002/btpr.2176

Gómez, R., Lara, G., Femat R., and Aguilar, R. (2015). On The Dynamic Behaviour of a Class of Bioreactor With Non-Conventional Yield Coefficient Form. *RMIQ. Vol. 14, No. 1,* 149-165.

HACH. *Chemical Oxygen Demand, Reactor Digestion Method; Method 8000*; HACH: Loveland, CO, USA, 2000.

Haldane, J. (1965). *Enzymes*. MIT Press, Cambridge, pp. 84.

Han, K., Levenspiel O. (1988). Extended monod kinetics for substrate, product, and cell inhibition. *Biotechnol. Bioeng.* 32, 430.

Hangos K. M., Bokor J. and Szederkényi G., (2013). Analysis and control of nonlinear process systems, Springer Science & Business Media.

Hanif, A., Yasmeen, A., Rajoka, M. (2004). Bioresour. Technol. 94 (2004) 311.

Havlik I., Scheper T. and Reardon K., (2015). Monitoring of microalgal processes. Adv Biochem Eng Biotechnol. 153: 89-142.

Hermann, R., & Krener, A. J. (1977). Nonlinear controllability and observability. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 22(5), 728–740.

Hillmer P. and Gest H., (1977). H<sub>2</sub> metabolism in the photosynthetic bacterium *Rhodospseudomonas capsulata*: H<sub>2</sub> production by growing cultures. *Journal of Bacteriology*, vol 129 No 2, 724-731.

Himpe C. (2018). The empirical gramian framework (EMGR). Algorithms.

Ibtissem Didi, Hacem Dib, Brahim Cherki. (2014). A Luenberger like observer for the AM2 model. [Research Report] Université de Tlemcen. fihal-00998310.

Imeni, S.M.; Pelaz, L.; Corchado-Lopo, C.; Busquets, A.M.; Ponsá, S.; Colón, J. (2019). Techno-economic assessment of anaerobic co-digestion of livestock manure and cheese whey (Cow, Goat & Sheep) at small to médium dairy farms. *Bioresour. Technol.* 291, 121872.

Jimenez, J.; Latrille, E.; Harmand, J.; Robles, A.; Ferrer, J.; Gaida, D.; Wolf, C.; Mairet, F.; Bernard, O.; Alcaraz-Gonzalez, V., (2015). Instrumentation and control of anaerobic digestion processes: A review and some research challenges. *Rev. Environ. Sci. Bio/Technol.* 14, 615–648.

Kadlec, P., Gabrys, B., & Strandt, S. (2009). Data-driven Soft Sensors in the process industry. *Computers and Chemical Engineering*.

Kalinci, Y., Hepbasli, A., & Dincer, I. (2009). Biomass-based hydrogen production: a review and analysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(21), 8799-8817.

Kalman, R. E. (1960). A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems. *Transactions of the ASME--Journal of Basic Engineering*. 82 D, 35-45.

Kapdan, K. I. and Kargi, F. (2006). Bio-hydrogen production from waste materials. *Enzyme Microb. Technol.*, 38, 569–582.

Kazantzis, N. and Kravaris, C. (2001). Discrete-time nonlinear observer design using functional equations. *Systems & Control Letters* 42, 81-94

Korbicz J. and Witczak M., (2007). LMI-based strategies for designing observers and unknown input observers for non-linear discrete-time systems. *Bulletin of the polish academy of sciences technical sciences*. Vol. 55, No. 1.

Kou S. R., Elliott D. L., Tarn T. J. (1973). Observability of non-linear systems. *Inf. Control.* 22, 189–99.

Lara J. and Dochain D. (2018). On-line estimation of the VFA concentration in anaerobic digestion processes based on a super-twisting observers. 5<sup>th</sup> International Conference on Control, Decision and Information Technologies (CoDIT), 545-549.

Lara J., Aguilar R., Dochain D. and Femat R., (2016). On-line estimation of VFA concentration in anaerobic digestion via methane outflow rate measurements. *Computers and Chemical Engineering*.

Larroche, C.; Sanroman, M.A.; Du, G.; Pandey, A. (2016). *Current Developments in Biotechnology and Bioengineering: Bioprocesses, Bioreactors and Controls*; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands.

Lecca P. and Ree A., (2019). Identifying necessary and sufficient conditions for the observability of models of biochemical processes. *Biophysical Chemistry* 254, 106257.

Letellier, C., Aguirre, L., Maquet, J. (2005). Relation between observability and differential embeddings for nonlinear dynamics. *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys.* 71:066213.

Liu, Y. Y.; Slotine, J. J.; Barabási, A. L. (2013). Observability of complex systems. *PNAS* 2013, 110, 2460-2465.

Lopez-Perez, P.A., Yescas, R.M., Acata, V.G., Caballero, V.P. and López, R.A. (2013). Software sensors design for the simultaneous saccharification and fermentation of starch to ethanol. *Fuel* 110, pp. 219-226.

López-Zapata B., Adam-Medina M., Álvarez-Gutiérrez P., Castillo-González J., Hernández-de León H., and Vela-Valdés L. (2017). Virtual Sensors for Biodiesel Production in a Batch Reactor. *Sustainability* 9, 455.

Luong, J. (1987). Generalization of monod kinetics for analysis of growth data with substrate inhibition. *Biotechnol. Bioeng.* 29, 242.

Luttmann, R., Bracewell, D. G., Cornelissen, G., Gernaey, K. V., Glassey, J., Hass, V. C., et al. (2012). *Soft Sensors in Bioprocessing: A Status Report and Recommendations*. *Biotechnol. J.* 7, 1040–1048.

Manish, S., & Banerjee, R. (2008). Comparison of biohydrogen production processes. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(1), 279-286.

Marcos, N., Guay, M., Dochain, D. and Zhang, T. (2004). Adaptive extremum-seeking control of a continuous stirred tank bioreactor with Haldane's kinetics. *Journal of Process Control* 14, 317-328.

Méndez-Acosta, H. O., Snell-Castro, R., Alcaraz-González, V., Pelayo-Ortíz, C., González-Álvarez, V. (2010). Anaerobic treatment of Tequila vinasses in a CSTR-type digester. *Biodegradation* 21, 357-363.

Mendez-Acosta, H.O., Hernandez-Martinez, E., Jáuregui-Jáuregui, J.A., Alvarez-Ramirez, J. and Puebla, H. (2013). Monitoring anaerobic sequential batch reactors via fractal analysis of pH time series. *Biotechnology and Bioengineering* 110, pp. 2131-2139.

Mesbahi, A., Bu, J., & Mesbahi, M. (2019). Nonlinear observability via koopman analysis: Characterizing the role of symmetry, *Automatica* 109353.

Mohammadi M., Younesi H., Najafpour G. and Mohamed A., (2011). Sustainable ethanol fermentation from synthesis gas by *Clostridium ljungdahlii* in a continuous stirred tank bioreactor. *J Chem Technol Biotechnol.* 87, 837-843.

Montanari, A.N. and Aguirre, L.A., (2020). Observability of network systems: A critical review of recent results. *J. Control Automat. Elect. Sys*, 31, 1348–1374.

Moreno, J., Rocha, E. and Vande Wouwer, A., (2014). A dynamical interpretation of strong observability and detectability concepts for nonlinear systems with unknown inputs: application to biochemical processes. *Bioprocess Biosyst Eng.* 37:37–49

Moser, A. (1985). Kinetics of batch fermentations, in Rehm. H. J., Reed, G. (Eds.), *Biotechnology Fundamentals of Biochemical Engineering*, Verlag Chemie, Weinheim, pp. 243–283.

Nahar, J.; Liu, J.; Shah, S.L. (2019). Parameter and state estimation of an agro-hydrological system based on system observability analysis. *Comp. Chem. Eng*, 121, 450–464.

Nandi R., Sengupta S., (1998). Microbial production of hydrogen: an overview. *Crit Rev Microbiol* 24(1), 61-84.

Nath, K., & Das, D. (2011). Modeling and optimization of fermentative hydrogen production. *Bioresource Technology*, 102(18), 8569-8581.

Núñez, S. (2014). Estimación y Control de Procesos Biotecnológicos Multivariable. Tesis de doctorado, Universidad Nacional de la Plata,

Núñez, S., Garelli, F. and De Battista, H. (2012). Sliding mode observer for biomass estimation in a biohydrogen production process. *International Journal of Hydrogen Energy* 37, pp. 10089-10094.

Ogata Katsuhiko (1998). *Ingeniería de control moderna*. Prentice-Hall, tercera edición.

Pérez, P.A.L., Neria-González, M.I., & López, R.A. (2015). Increasing the bio-hydrogen production in a continuous bioreactor via nonlinear feedback controller. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40 (48), 17224-17230.

Powel N. D. and Morgansen K. A. (2015). Empirical observability gramian rank condition weak observability of nonlinear systems with control. 54<sup>th</sup> Conference on Decision and Control (CDC), 6342-6348.

Prazeres, A.R.; Carvalho, F.; Rivas, J. (2012). Cheese whey management: A review. *J. Environ. Manag.* 110, 48–68.

Pruneda R., Solares C., Conejo A. and Castillo E., (2010). An efficient algebraic approach to observability analysis in state estimation. *Electric Power System Research* 80, 277-286.

Ramkrishna D. H. and Song S., (2016). "Cybernetic modeling for bioreaction engineering". Cambridge University Press.

Rapaport, A., Dochain, D., Harmand, J., Acuña, G. (2008). "Unknown Input Observers for Biological Processes". 17th IFAC World Congress (Seoul, 2008).

Richard, R.; Li, Y.; Dubreuil, B.; Thiebaud-Roux, S.; Prat, L. (2011). On-line monitoring of the transesterification reaction between triglycerides and ethanol using near infrared spectroscopy combined with gas chromatography. *Bioresour. Technol.* 2011, 102, 6702–6709.

Riffat, R. (2013). "Fundamentals of wastewater treatment and engineering". Londres: IWA Publishing, CRC Press.

Ritter B., Mora E., Schlicht T., Schild A. and Konigorski U., (2018). *Journal of Physics: Conf. Series* 1037, 1-11.

Rodríguez A., Quiroz G., Femat R., Méndez H. O. and de Leon J., (2015). An adaptive observer for operation monitoring of anaerobic digestion wastewater treatment. *Chemical Engineering Journal*. 269, 186-193.

Rodríguez, A., Quiroz, G., Femat, R., Méndez-Acosta, H. O., & de León, J. (2015). "An adaptive observer for operation monitoring of anaerobic digestion wastewater treatment". *Chemical Engineering Journal*, 269, 186-193.

Rodríguez-Núñez, J., Castillo, B., Peña, C. and Ortega, F. (2015) "Software Sensors Design for Monitoring of Variables in Reactor: A Biological Processes Application". IEEE 2nd Colombian Conference on Automatic control (CCAC).

Russell, E.L., Chiang, L.H., Braatz, R.D., 2012. Data-driven methods for fault detection and diagnosis in chemical processes. Springer Science & Business Media.

Salama, E.S., Jeon, B.H., Chang, S.W., Lee, S.h., Roh, H.-S., Yang, I.S., Kurade, M.B., El- Dalatony, M.M., Kim, D.-H., Kim, K.H., Kim, S., (2017). Interactive effect of indole-3- acetic acid and diethyl aminoethyl hexanoate on the growth and fatty acid content of some microalgae for biodiesel production. *J. Clean. Prod.* 168, 1017–1024.

Sbarciog M., Moreno J. and Wouver V., (2014). Application of super-twisting observers to the estimation of state and unknown inputs in an anaerobic digestion system. *Water Science & Technology*, 69.

Schügerl K, Bellgardt H. *Bioreaction Engineering*. Berlin, Heidelberg: Springer; 2000.

Singh A. K. and Hahn J. (2005). Determining optimal sensor locations for state and parameter estimation for stable nonlinear systems. *Ind. Eng. Chem. Res.* 44, 5645-5659.

Sontag, E. D. (1991). Kalman's controllability rank condition: From linear to nonlinear. In A. C. Antoulas (Ed.), *Mathematical system theory: The influence of R. E. Kalman* (pp. 453–462).

Srivastava N., Srivastava M. and Mishra P. K., (2020). Biofuel production technologies: Critical analysis for sustainability. *Clean Energy Production Technologies*. Springer.

Steyer, J., Bouvier, J., Conte, T., Gras P., Sousbie, P. (2002). Evaluation of a four year experience with a fully instrumented anaerobic digestion process. *Water Science and Technology*. 45, 495 – 502.

Sun C. and Hahn J. (2012). Documentation for model reduction routines for matlab. Department of Biochemical Engineering. Troy N.Y. USA.

Vaidyanathan, S. (2016). *Nonlinear Observer Design for Population Biology Systems*. Springer International Publishing, DOI 10.1007/978-3-319-30169-33.

Villaverde A. F., (2019). Observability and structural identifiability of nonlinear biological systems, *Complexity*, pp. 1–12.

Whalen A. J., Brennan S. N., Sauer T. D. and Schiff S. J., (2015). Observability and controllability of nonlinear networks: The role of symmetry. *Physical Review X*, 5, 011005.

Wiese, J. & König, R. (2009). From a black-box to a glass-box system: the attempt towards a plant-wide automation concept for full-scale biogas plants. In: *Water Science and Technology* (H. Kroiss, ed). London, IWA Publishing, pp321-327.

Zabczyk, J. (1995). *Mathematical control theory: An introduction* (2nd ed.). Boston: Birkhäuser.

Zhang, M., Yue, T., Ali, S., Selic, B., Okariz, O., Norgre, R., & Intxausti, K. (2018). Specifying uncertainty in use case models. *Journal of Systems and Software*, 144, 573-603.

Zhirabok, A., & Shumsky, A. (2012). An approach to the analysis of observability and controllability in nonlinear systems via linear methods. *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science*, 22(3), 507–522.

Zúñiga, I. T., Vargas, A., Latrille, E., & Buitrón, G. (2015). Robust observation strategy to estimate the substrate concentration in the influent of a fermentative bioreactor for hydrogen production. *Chemical Engineering Science*, 129, 126-134.