

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA
Unidad Iztapalapa

DIVISION DE CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA DE PROCESOS E HIDRAULICA

TESIS DE MAESTRIA EN INGENIERIA QUIMICA

ESTIMACION DE UN REACTOR DE
HOMOPOLIMERIZACION VIA RADICALES LIBRES
USANDO MEDICIONES DISCRETAS-RETARDADAS

Presenta:

I.Q. HECTOR HERNANDEZ ESCOTO

Asesor:

DR. JESUS ALVAREZ CALDERON



Septiembre de 1998

AGRADECIMIENTOS

Agradezco, en la realización de mis estudios de Maestría y de la presente tesis:

En primer lugar, al Depto. de Ing. Química de la Universidad Autónoma Metropolitana (Iztapalapa) por haberme dado la oportunidad de realizar mis estudios de Maestría dentro de su programa de posgrado. De forma especial a los Doctores que me dieron clases: Alberto Soria, Mario Vizcarra, Gustavo Fuentes, Alberto Ochoa y Tomás Viveros.

Al Dr. Jesús Álvarez Calderón, mi maestro en cursos de Maestría y asesor en el desarrollo de esta tesis, de quien he recibido un gran apoyo en todos los sentidos.

A mi jurado de examen de grado: Dr. Jesús Álvarez Calderón (Presidente), Dr. Roberto Olayo Gonzalez (Secretario), M.C. Francisco López Serrano (Vocal). Ha sido un gran honor el que hayan evaluado mi tesis.

Mis estudios de Maestría y el desarrollo de la presente tesis se llevaron a cabo gracias al valioso apoyo económico que recibí de:

El Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología: Beca-Crédito Nacional.

El Centro de Investigación en Polímeros: “Galardón” otorgado para la realización de mi proyecto de investigación, en base a su Programa de Apoyo a la Formación de Recursos Humanos.

El Sistema Nacional de Investigadores: Beca de Ayudante de Investigador.

DEDICATORIAS

Mientras más estudio más se amplía mi campo de ignorancia

Sofronisco

Dedico esta tesis a:

Mis Padres

Ma. Prudencia Escoto de Hernández

L. Edmundo Hernández Sanchez

Y a Mis Hermanos

Mercedes, Rodolfo y Laura

Agradeciendo su cariño y apoyo incondicional, en todo momento, para la realización de esta empresa.

Mi tía Soledad Hernández, la Fam. Avilez Pedraza y mi prima Victoria Avilez Hdz.

Mi familia aquí en México, D.F.

A mis amigos y compañeros de Generación de la Maestría: Alfredo Guevara, Claudia García, Carlos Ortiz, Francisco Caballero, Mayela García y Miguel A. Rodríguez.

A mis “hermanos” de Línea de Investigación: Teresa López A., Eduardo Hernández P. y Carlos Fernández Z.

Gracias por su amistad y valiosos consejos.

En fin, a todos mis compañeros y amigos con los que he convivido a lo largo de la realización de la Maestría.

Sobre Todo, Agradezco y Dedico el Presente Trabajo a DIOS

.....

INDICE

	Pag.
Introducción	01
I.1 Competencia en la Producción de Polímeros	02
I.2 Los Reactores de Polimerización	03
I.3 Estimación de Estados en Reactores de Polimerización	04
I.4 Antecedentes y Justificación del Proyecto	06
I.5 Objetivo del Proyecto	06
I.6 Organización de la Tesis	06
Capítulo 1. El Reactor de Polimerización y el Problema de Estimación	08
1.1 El Sistema	09
1.2 Polimerización Vía Radicales Libres y Mecanismo de Reacción	10
1.3 Modelo Matemático	11
1.4 El Problema de Estimación	15
1.5 Condiciones de Operación y Comportamiento del Reactor	16
Capítulo 2. Problema 1.	
Estimación del Reactor Usando Mediciones Continuas-Instantáneas	20
2.1 Propiedad de Estimabilidad del Reactor	21
2.2 Construcción del Estimador	22
2.3 Sintonización del Estimador	25
2.4 Desempeño del Estimador	27
2.5 Observaciones	32
Capítulo 3. Problema 2.	
Estimación del Reactor Usando Mediciones Continuas-Instantáneas y Discretas-Retardadas	33
3.1 Propiedad de Estimabilidad del Reactor	34
3.2 Construcción del Estimador	35
3.2.1 El Estimador-P	37
3.2.2 El Estimador-PI	39
3.2.3 Funcionamiento del Estimador	41
3.2.4 Corrección entre Intervalos para los Estados cuyas Mediciones son DR	42
3.3 Sintonización del Estimador	43
3.3.1 Sintonización del Estimador-P	43
3.3.2 Sintonización del Estimador-PI	45
3.3.3 Criterio de Deadbeat	46
3.4 Desempeño del Estimador	46
3.4.1 Estimación Nominal	47
3.4.2 Estimación con Errores Paramétricos	47
3.5 Figuras	50

Conclusiones y Recomendaciones para Trabajo Futuro	60
Apéndice I. Funcionalidades y Parámetros del Modelo Matemático del Reactor	62
Apéndice II. Estimación Dinámica de Plantas No lineales	68
Bibliografía	77

INTRODUCCION

En este preámbulo, primero se reseña la importancia de los polímeros, la competencia en su producción y las características generales de los reactores de polimerización con énfasis en la importancia del monitoreo de ellos, siendo esto la motivación y justificación del presente trabajo. Enseguida, para entender el monitoreo y soportar la justificación del presente trabajo se describe el estado del arte en estimación no lineal y su aplicación a reactores de polimerización. Luego, se plantea el problema concreto a abordar en este trabajo: estimación de estados de un reactor de polimerización por radicales libres (incluyendo peso molecular y polidispersidad del polímero) a partir de mediciones discretas retardadas, cosa que es crucial para el monitoreo de la calidad y que no se ha abordado este problema para técnicas avanzadas no lineales de tipo geométrico. Finalmente se plantea la metodología que se sigue en la solución del problema.

INTRODUCCION

I.1 Competencia en la Producción de Polímeros

Los polímeros tienen un gran impacto en la vida cotidiana de las personas debido al gran incremento, en esta segunda mitad de siglo, de productos manufacturados a base de ellos (ropa, carrocerías de automóviles, cascos de botes, bolsas, juguetes, llantas, pegamentos, recubrimientos y pinturas, etc., sólo basta “echar un ojo” a nuestro alrededor). Esto es resultado de la síntesis de nuevas fibras, plásticos, elastómeros, adhesivos y resinas. Y no es de sorprenderse que más del 50% de todos los químicos e ingenieros químicos, un gran número de físicos e ingenieros mecánicos, y casi todos los científicos de materiales y tecnólogos textiles están involucrados en trabajos de investigación y desarrollo en polímeros.

Los polímeros parten de los petroquímicos básicos por lo tanto proporcionan al petróleo un alto valor agregado y se incrementa a medida que los polímeros sean de “especialidad”. De tal manera, los productores de polímeros de volúmenes grandes tienden hacia una producción con calidad más uniforme (entendiéndose este término desde el punto de vista que en la industria los productos son mezclas de polímeros de diferentes longitudes de cadena) y los productores de polímeros de alta calidad (y valor), pero de volúmenes bajos, tienden hacia una mayor producción.

Aunado a lo anterior, el aumento en la demanda de los polímeros, la competencia en precios y la apertura global de los mercados han obligado a las plantas industriales productoras de polímeros a obtener un mejor compromiso entre velocidad de producción, márgenes adecuados de seguridad-operabilidad, requerimientos de calidad del producto polimérico y restricciones ambientales para garantizar así la rentabilidad y competitividad de ellas. Por lo tanto se ha requerido la búsqueda de nuevas tecnologías (producto, equipo, proceso, automatización,...) y/o la innovación de las existentes. Además, para dos plantas que utilizan la misma tecnología de producto, la diferencia competitiva entre ellas puede quedar definida por la tecnología de automatización que cada planta utiliza.

En México, la industria de los polímeros es uno de los sectores productivos que posee mayor posibilidad de competir con éxito en el ámbito internacional ya que, a parte de tener una posición ventajosa por ser un país con una gran fuente de petróleo, cuenta con bastante experiencia en operación de procesos de producción de polímeros y exporta diversos productos poliméricos. Aunque ya se han formado diversos grupos de investigación y desarrollo tanto en el sector industrial como en instituciones de educación superior, las compañías establecidas muestran una alta dependencia tecnológica del exterior y por lo general carecen de los medios económicos y de los grupos técnicos con suficiente experiencia para concluir las innovaciones de manera eficiente.

I.2 Los Reactores de Polimerización

Los reactores constituyen la parte medular de cualquier planta industrial productora de polímeros. Existen diferentes tipos de reactores ya que los polímeros se producen en una gran variedad de condiciones debido a la amplia gama de las cinéticas de polimerización y medios.

Atendiendo a la cinética, los procesos de polimerización se clasifican en tres grandes categorías: condensación, adición y desdoblamiento de anillos. En la condensación las moléculas de monómeros reaccionan liberando una pequeña molécula como el agua. La polimerización de adición (vía radicales libres, iónica y de coordinación, fotolítica y electrolítica) ocurre por reacciones de poliadición de olefinas o compuestos carbonilos. Y la polimerización por desdoblamiento de anillos ocurre por el rompimiento de un anillo con la subsecuente adición del producto lineal al sitio activo de una cadena creciente.

La mayoría de las polimerizaciones se realizan en fase líquida. La polimerización se puede llevar a cabo en masa, en solución, en suspensión y en emulsión. En la polimerización en masa el polímero puede ser soluble en el monómero, hinchado por el monómero o insoluble en él. En solución el polímero y el monómero pueden ser solubles en el solvente o, el monómero puede ser soluble y el polímero no. En masa y en solución, en ambos casos, el medio de polimerización puede ser homogéneo o heterogéneo dependiendo del grado de solubilidad del polímero en el monómero en el primer caso y, de los grados de solubilidad del monómero y polímero en el solvente en el segundo caso. Las polimerizaciones en suspensión y en emulsión ocurren en sistemas de dos fases en donde, para la suspensión, la mezcla monómero-no solvente tiene al iniciador disuelto en la fase monómero y, para el sistema en emulsión, en la del no solvente.

Los reactores industriales de polimerización adoptan diferentes configuraciones y pueden ser clasificados en los siguientes tipos ideales: de lote de tanque agitado, continuo de flujo pistón, continuo de tanque agitado homogéneo y segregado. Cada uno de estos tipos de reactores tienen características de operación que lo hacen apropiado para un cierto proceso de polimerización.

Los reactores de polimerización presentan las siguientes características particulares:

- i) Presentan estructuras de estado estacionario no lineales. Antes de considerar la dinámica del proceso, uno debe notar que los reactores continuos pueden tener múltiples estados estacionarios los cuales son extremadamente sensibles a pequeños cambios en las condiciones de operación; además la estructura de estado estacionario cambia completamente con pequeñas variaciones en los parámetros del proceso y condiciones de operación.
- ii) Se pueden presentar dinámicas de reacción complejas, p. ej., oscilaciones autónomas para reactores tipo lote.
- iii) A partir del punto anterior, se pueden tener problemas de control del reactor y por consecuencia de seguridad.
- iv) La arquitectura molecular del polímero es sensible a las condiciones de operación del reactor y por lo tanto la calidad del polímero se determina en su etapa de síntesis. De tal manera que cambios en las condiciones de alimentación, mezclado, temperatura, etc., pueden alterar propiedades moleculares tales como la distribución de los pesos moleculares, grado de ramificación, estereo regularidad.

Se puede notar que las anteriores características tienen una influencia decisiva en cualquiera de las actividades que comprenden el diseño y/o rediseño de los reactores de polimerización. Luego entonces, para llevar a cabo cualquiera de tales actividades es crítico el monitoreo de las variables del proceso tales como la conversión, que determina la velocidad de producción, la temperatura y volumen del reactor, que señalan la seguridad de operación del proceso, y la distribución de longitud de cadena, que determina la calidad del producto.

Sin embargo, el problema de monitoreo de los reactores de polimerización es uno de los más serios (y es de suponerse debido a la complejidad del proceso). Variables independientes al reactor como los flujos de entrada y salida, la temperatura de entrada, la temperatura del sistema de intercambio de calor y algunas variables del reactor como la temperatura o concentración de los reactivos son relativamente fáciles de medir. Pero la medición de aquellas variables que definen las propiedades estructurales del polímero no es tan sencilla ya que, aunque se han hecho importantes avances en las técnicas analíticas como la cromatografía de permeación en gel o la cromatografía por exclusión de tamaño para obtener la distribución de pesos moleculares, se necesita hacer un muestreo de la mezcla polimérica e introducirla a un cromatógrafo requiriendo considerables tiempos de análisis y obteniéndose datos discretos y con retardo, a diferencia de las mediciones mencionadas anteriormente que se obtienen en línea de forma continua e instantánea. Aún así, la medición de muchas variables del proceso no es tan sencilla y en muchas situaciones se prefieren hacer mediciones indirectas; por ejemplo, para evitar bloqueo entre medidores se utilizan sensores radioactivos para medir volumen y densidad; se utilizan medidores de presiones de vapor para detección de composición y temperatura de la mezcla reaccionante o, la conversión en reactores de tipo lote puede ser estimada a partir de un balance de calor entre el reactor y el sistema de enfriamiento para lo cual se adaptan sistemas calorimétricos al reactor.

1.3 Estimación de Estados en Reactores de Polimerización

En principio, el problema en el monitoreo de los reactores de polimerización se puede atacar usando estimadores de estados. Los estimadores de estados, que consisten de un modelo del proceso inexorablemente aproximado, son procesadores dinámicos de las mediciones disponibles de entradas y salidas que producen estimados aceptables de los estados y propiedades de interés del proceso. Las mediciones disponibles, directas o indirectas de los estados, pueden estar sujetas a errores estocásticos y perturbaciones del proceso.

Los modelos de los reactores de polimerización son necesarios para predecir, de forma aproximada, el comportamiento del reactor, además de ayudar en el entendimiento de éste. Dichos modelos, basados en balances de masa y energía, presentan los siguientes tres problemas básicos:

- i) son altamente no lineales.
- ii) los parámetros involucrados son desconocidos en muchos casos y su determinación y/o estimación puede ser complicada
- iii) son sensibles a pequeñas perturbaciones

Tomando en cuenta las características del modelo, los reactores de polimerización son lo que se les llama plantas o sistemas no lineales. Tales modelos generalmente toman forma de ecuaciones de estado los cuales además pueden dar información de la estructura molecular por

medio de los primeros momentos de la distribución de los pesos moleculares de la mezcla polimérica obtenida.

Para sistemas lineales se puede decir que existe una teoría ya madura sobre estimación, sin embargo, los modelos de los reactores de polimerización son altamente no lineales. Para tomar en cuenta este gran inconveniente, lo que se hace es trabajar con una versión linealizada del modelo alrededor de un punto de operación nominal pero, el desempeño que se obtiene en la estimación es pobre.

Para lograr un mejor desempeño se requiere trabajar con técnicas de estimación no lineal. Existen básicamente cuatro estrategias: i) el Filtro Extendido de Kalman (FEK) (Meditch, 1969), cuyo diseño es simple pero carece de criterios de convergencia y procedimientos sistemáticos de sintonización; ii) el Observador Geométrico (OG) (Krener e Isidori, 1983; Krener y Respondek, 1985); iii) la Estrategia de Alta Ganancia (EAG) (Deza y col., 1992; Cicarella y col., 1993) y, iv) la Estrategia de Modo Deslizante (EMD) (Slotine y col., 1987; Wang y col., 1997).

Probablemente el FEK es la técnica más usada en la ingeniería de procesos (Griffin y col., 1988; Litchfield y col., 1979). En lo que nos concierne, los reactores de polimerización, el FEK es por mucho el más usado ya que se han encontrado buenos resultados en su aplicación (Ray, 1986, Ellicabe y Meira, 1988) y, además de tener construcción simple, permite el uso de mediciones continuas y discretas como se puede apreciar en los trabajos de Schuler y Suzhen (1985), Schuler y Papadopoulou (1986), Ellis y col. (1988), Ellis y col. (1994), Dimitratos y col. (1991), Aguilar (1993), Mutha y col. (1997a.), Mutha y col. (1997b.).

Las tres últimas estrategias, a las que se les llaman avanzadas, garantizan convergencia pero el OG aplica a una clase restringida de plantas, la EAG tiene procedimientos complejos de sintonización y la EMD tiene un diseño elaborado. Además de que estas tres últimas técnicas se han aplicado raramente en ingeniería química, en ellas solo se ha hecho uso de mediciones continuas.

Las cuatro técnicas anteriores están restringidas a plantas no lineales completamente observables, en un sentido a lazo abierto adecuado (Krener y Respondek, 1985). Su extensión a plantas parcialmente observables (p. ej. detectables) no parece ser directa como puede verse en el trabajo de Tsinias (1990).

Alvarez (1997) propone una estrategia de estimación robusta que combina las técnicas del observador geométrico y el de alta ganancia. A diferencia de los estimadores básicos mencionados, ésta estrategia aplica tanto a sistemas observables y detectables, posee prueba robusta de estimabilidad, criterios de convergencia y procedimientos sistemáticos de construcción y sintonización. Esta estrategia se ha aplicado, en un estudio simulado, a un reactor de homopolimerización en masa vía radicales libres de metil metacrilato (aunque el esquema está desarrollado para cualquier polimerización que se lleve a cabo por esta vía) en el cual se usan mediciones continuas de temperatura, volumen y densidad (o lo que es lo mismo, para este sistema, de concentración de monómero), detectando el peso molecular promedio y la polidispersidad del producto polimérico con un pequeño sesgo.

I.4 Antecedentes y Justificación del Proyecto

Cabe mencionar que en los últimos diez años, el grupo de investigación de Alvarez (Depto. de Ing. Química, UAM-I) ha investigado, entendiendo y aplicando industrialmente metodologías de diseño y operación de procesos industriales, con énfasis en reactores de polimerización. En particular, el reactor (lote, semilote o continuo) de polimerización por radicales libres se ha estudiado porque tiene muchas de las peculiaridades y problemas de la mayor parte de los reactores de polimerización. Para esta clase de reactores, ya se han abordado los siguientes problemas: control con retroalimentación de estados (Alvarez y col., 1990, 1991), control para el arranque de un reactor continuo utilizando mediciones de salidas (Alvarez y col., 1994), control utilizando un estimador no-lineal (Alvarez, 1996), inferencia de estados a partir de mediciones (Alvarez, 1997; López y Alvarez, 1997), diseño de estimadores robustos (es decir, tolerantes a errores de modelado) (Alvarez, 1997) y diseño de controles para aplicación industrial inmediata (Padilla y Alvarez, 1997).

Volviendo al problema de estimación, en el estimador robusto de Alvarez (1997) aplicado al reactor de polimerización sólo se han utilizado mediciones continuas-instantáneas (temperatura, volumen, densidad o índice de refracción) y es natural ahora investigar como mejorar el esquema de estimación. Para lo cual, se proyecta la utilización de mediciones de la distribución de pesos moleculares (generadas por un cromatógrafo en línea). Debido a la naturaleza discreta y retardada de tales mediciones, como es bien sabido en la teoría de estimación, el problema de estimación es complicado.

I.5 Objetivo del Proyecto

Por lo mencionado anteriormente el objetivo es el de diseñar un esquema de estimación no lineal para inferir los estados en línea de un reactor de homopolimerización vía radicales libres en masa usando como mediciones continuas-instantáneas la temperatura, el volumen y la densidad de la mezcla reaccionante (o concentración de monómero) y, teniéndose de forma discreta-retardada los momentos de la distribución de los pesos moleculares que caracterizan la calidad del producto. De esta forma, obtener finalmente en línea las variables de calidad del producto polimérico: Peso Molecular Promedio y Polidispersidad. Pretendiéndose que la metodología obtenida en el diseño del estimador pueda aplicarse a casi todos los reactores de polimerización en donde se requiera un buen monitoreo de la calidad del producto.

I.6 Organización de la Tesis

El estimador propuesto consiste de un modelo con un corrector-predicador accionado por los errores planta modelo de salida, resultando un procesador dinámico de datos alimentado por mediciones continuas-instantáneas y discretas-retardadas que a su vez genera un estimado convergente de las propiedades de interés.

En el Capítulo 1 (y Apéndice I) se presenta el modelo de aproximación el cual se basa en la funcionalidad del efecto gel y en su extensión, con principios reocinéticos, a la descripción de la viscosidad y el coeficiente de transporte.

En el Capítulo 2, utilizando la estrategia de estimación de Alvarez (1997) (Apéndice II), se presenta la construcción de un estimador que sólo utiliza mediciones continuas-instantáneas. Este problema ya fue resuelto y su desarrollo se presenta únicamente como un marco de referencia metodológico para el diseño del estimador que utilizará también mediciones discretas-retardadas.

En el Capítulo 3, teniendo el marco metodológico de referencia del capítulo anterior, se expone el diseño del estimador que utiliza también mediciones discretas-retardadas. Esto es lo que constituye la aportación de este proyecto de investigación.

Los resultados muestran que el estimador converge con buen desempeño a pesar de utilizar un modelo con errores paramétricos. Finalmente se presentan las Conclusiones de este trabajo.

CAPITULO 1

EL REACTOR DE POLIMERIZACION Y EL PROBLEMA DE ESTIMACION

En este capítulo, primero se justifica la elección del reactor de estudio. Ya que para cualquier actividad es requisito indispensable tener una descripción adecuada del proceso, se describe el mecanismo cinético de reacción para tener una idea de lo que pasa a nivel molecular y, posteriormente, se presenta el modelo matemático del reactor junto con una descripción de la cinética de reacción y las aproximaciones que se hacen para llegar a él. Las ecuaciones son reescritas en notación de control moderno, siendo de esta forma más adecuadas para el esquema de estimación. Finalmente se especifica el problema de estimación a resolver sobre este reactor y se dan las condiciones físicas de operación del reactor.

CAPITULO 1

EL REACTOR DE POLIMERIZACION Y EL PROBLEMA DE ESTIMACION

1.1 El Sistema

Se considera un reactor continuo de tanque agitado (Fig. 1) donde se lleva a cabo una homopolimerización vía radicales libres generados por un iniciador.

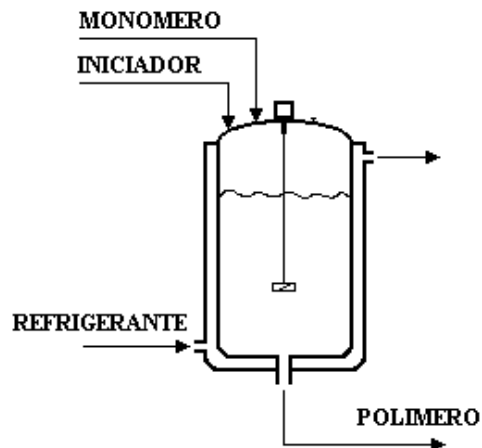


Figura 1. El Reactor de Polimerización

Se hace el estudio sobre este sistema ya que presenta casi todas las características peculiares y problemas de los reactores de polimerización:

- i) Puede tener hasta tres estados estacionarios (dos estables y uno inestable) y presentar una dinámica oscilatoria estable dependiendo de las condiciones de operación.
- ii) Todas las reacciones (específicamente en el paso de propagación) son altamente exotérmicas: en el orden de 20 cal/mol para la mayoría de los monómeros comunes.
- iii) La conversión de monómero a polímero reduce el volumen libre de la mezcla reaccionante, incrementándose su viscosidad y densidad. A altas conversiones, la mezcla del reactor puede llegar a ser muy viscosa, y se puede incrementar en un orden de seis veces su magnitud cuando la reacción progresa de 0 a 60 %. Esto causa problemas de bombeo y mezclado y, la energía mecánica requerida para tal operación también puede incrementar la temperatura.
- iv) El encendido del efecto gel (se explica en la siguiente sección), debido al incremento de la viscosidad, causa reacciones no controlables que resultan en un rápido aumento de la temperatura, rápida conversión y taponamiento del equipo.
- v) Además del punto anterior, la mezcla reaccionante tiene baja capacidad térmica y por lo tanto el sistema de intercambio de calor del reactor tiene una limitada capacidad de eliminación de calor. Esto nos lleva a problemas de disparo térmico y por consiguiente de seguridad. De hecho, los procesos en solución, suspensión y en emulsión se prefieren para contrarrestar tales dificultades.

Además, esta clase de reactores ya ha sido ampliamente estudiada (Schmidt y Ray, 1981; Jaisinghani y Ray, 1981; Hamer y col., 1981) y varias veces utilizado en investigaciones (Alvarez y col., 1994; Alvarez, 1996, 1997).

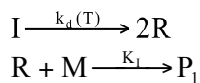
1.2 Polimerización Vía Radicales Libres y Mecanismo de Reacción

Las reacciones de polimerización vía radicales libres son de gran importancia tecnológica. De la industria petroquímica se obtienen grandes cantidades de monómeros para este tipo de reacciones y los polímeros obtenidos son la base de mucha de la industria del polímero ya que muchos polímeros comerciales son manufacturados por procesos vía radicales libres, p. ej., polietileno de baja densidad, polimetilmetacrilato, poliestireno, poliacrilonitrilo, policloruro de vinilo (PVC) y muchos otros más.

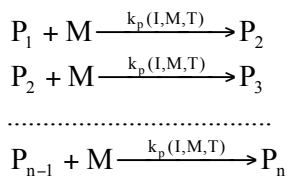
Una polimerización por radicales libres es una reacción en cadena que como su nombre lo indica, se inicia por radicales libres. Los radicales libres son moléculas o partes de molécula, sin carga electrónica, en donde uno o varios átomos tienen electrones de valencia dispares. Los electrones π del doble enlace de una molécula de monómero se juntan a los electrones π del doble enlace de otra molécula de monómero. Entonces todos los monómeros utilizados tienen un doble enlace (o varios), como el metil metacrilato (MMA) ($\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)\text{COOCH}_3$) que además tiene dos sustituyentes.

Para nuestro sistema se adopta el siguiente esquema básico de reacción:

1. Iniciación. Ya que la presencia de radicales libres es indispensable, ellos se producen inicialmente utilizando un iniciador, como el azobis-iso-butiro-nitrilo (compuesto azóico, $(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{CN})\text{N}=\text{NC}(\text{CN})(\text{CH}_3)_2$). Al calentar el iniciador se descompone en dos radicales con la eliminación de una molécula de nitrógeno. Luego, el radical formado reacciona sobre una molécula de monómero y lo “activa” a un nuevo radical. Es la etapa de iniciación de la cadena.

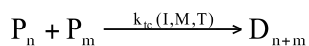


2. Propagación. Consiste en la adición (ataque) de un radical libre de cadena en crecimiento al doble enlace de una molécula de monómero, aumentando en una unidad la longitud de la cadena y regenerándose el radical. El proceso es repetitivo. Es importante notar que este paso es altamente exotérmico

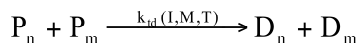


3. Terminación. En este paso se destruyen los radicales libres de cadena al reaccionar dos de ellas. Se puede llevar a cabo de dos formas.

i) Por Combinación o Adición. Los electrones dispares de dos radicales de cadena en crecimiento se combinan de nuevo para formar un enlace covalente y así formar una sola cadena.



ii) Por Desproporción. El hidrógeno final de uno de los dos radicales en crecimiento y su electrón libre se fijan sobre el segundo radical, luego, se obtienen dos cadenas macromoleculares, una terminada por una extremidad saturada y la otra por un doble enlace.



En esta reacción de polimerización también puede estar presente el paso de transferencia de cadena a monómero o a polímero. En este paso el monómero (o polímero) destruye un radical en crecimiento produciéndose la activación del monómero (o polímero) a radical. Es de hecho una reacción de desplazamiento del radical. Sin embargo, no se toma en cuenta este paso porque sus efectos son despreciables con respecto a los pasos básicos (Cardenas y O'Driscoll, 1976; Cardenas y O'Driscoll, 1977), además es raro que se lleve a cabo la transferencia a polímero.

A veces se agregan compuestos llamados “Agentes de Transferencia” para disminuir el peso molecular del polímero obtenido. En este caso el agente de transferencia destruye un radical de cadena en crecimiento dando nacimiento a otro radical (del agente) el cual en muchos casos reacciona con un monómero y lo activa.

1.3 Modelo Matemático

Ya habiendo visto lo que pasa en el reactor al nivel molecular, ahora se hace un estudio teórico de lo que sucede.

Se tiene entonces el caso más sencillo en que el medio de reacción es homogéneo (polímero soluble en el monómero) y constantemente agitado. El estudio teórico de la polimerización por radicales libres es posible solamente con la ayuda de ciertas hipótesis que podemos justificar en la mayoría de los casos con la experimentación:

1a. Hipótesis. Independencia de la reactividad de las cadenas activas y de su longitud. Es decir que la constante de velocidad (k_p) es independiente de la longitud de cadena ya formada.

2a. Hipótesis. La cadena cinética es larga, es decir, que cada radical participa en un gran número de reacciones de propagación antes de la terminación. Esto permite decir que la velocidad de polimerización es igual a la velocidad de desaparición del monómero.

3a. Hipótesis. Estado cuasiestacionario de los radicales libres, según la cual, la velocidad de iniciación (formación de radicales) es igual a la velocidad de terminación (desaparición de centros activos).

A conversiones altas, los tres pasos básicos de reacción (iniciación, propagación y terminación) son controlados por limitaciones difusionales. Los efectos difusionales en estos tres pasos son llamados como el efecto jaula, vítreo y gel, respectivamente.

La velocidad de iniciación de la cadena es menor que la velocidad a la cual se descompone el iniciador y, entonces, solo una fracción de los radicales del iniciador se unen a los monómeros. Dicha fracción se identifica como el factor de eficiencia del iniciador y se considerare (y consideraremos) constante (Cardenas y O'Driscoll, 1976; Chiu y col, 1983). En realidad, el efecto jaula causa una disminución del factor de eficiencia a altas conversiones (Seta y Guata, 1995).

El efecto vítreo ocurre a muy alta conversión y cuando el paso de propagación es severamente controlado difusionalmente. Este efecto se acompaña de una disminución de la constante de velocidad de propagación (k_p) y más allá de este punto la mezcla reaccionante se pone vidriosa.

El efecto gel o Trommsdorf causa una autoaceleración en la tasa de polimerización debido a severas limitaciones difusionales en la reacción de terminación. Además, causa incrementos descontrolados de temperatura y una disminución en el grado de polimerización que da como resultado ensanchamiento de la distribución de pesos moleculares (DPM) y un deterioro de las propiedades mecánicas del producto. Se observa una disminución en las constantes de velocidad de terminación (k_{tc} y k_{td}).

Lo antes mencionado subraya la importancia de un entendimiento de los factores que gobiernan las cinéticas de la reacción de polimerización, en particular, en la región del efecto gel.

Existen muchos estudios sobre el efecto gel. Los primeros modelos fueron relaciones empíricas y luego, con el avance de la teoría de la difusión en polímeros, se han propuesto otros de tipo semi-empírico basados en la teoría de entrecruzamiento de cadenas de polímero y volumen libre del sistema. En estos modelos se establece un punto crítico a partir del cual los efectos difusivos empiezan a operar. Este punto crítico se asocia, matemáticamente, con una discontinuidad en términos de la conversión del monómero y/o la longitud de cadena. Sin embargo, esto causa problemas para propósitos de optimización.

Chiu y col. (1983) proponen un modelo en el cual consideran los efectos difusionales como una parte integral de los pasos de las reacciones de propagación y terminación desde el principio del proceso de polimerización. De este modo, los efectos (gel y vítreo) de las limitaciones difusionales se incrementan con la conversión y llegan a predominar a conversiones altas. Entonces, se elimina la presencia del punto crítico. Este modelo tiene las características, además de describir la polimerización en todo el curso del proceso, de ser útil en simulaciones de procesos y cálculos de diseño ya que debe predecir datos experimentales utilizando solamente un pequeño número de parámetros de ajuste; los parámetros del modelo deben tener en lo posible un significado físico de tal manera que sus valores puedan ser estimados a priori para diferentes sistemas y, que sea de fácil implementación en computadoras.

En este trabajo se adopta el siguiente modelo que obtienen Alvarez y col. (1990, 1991) para un reactor continuo basándose en la funcionalidad del efecto gel de Chiu y col. (1983) y en

la teoría de volumen libre para la descripción de la viscosidad de la mezcla reaccionante y el coeficiente de transporte:

$$\dot{I} = -r_I(I, T) + \varepsilon r_{\text{pol}}(I, m, T)I + \frac{W_I - q_e I}{V} \quad (I,1.a)$$

$$\dot{m} = -r_{\text{pol}}(I, m, T) + \varepsilon r_{\text{pol}}(I, m, T)m + \frac{q_e}{V}(m_e - m) \quad (I,1.b)$$

$$\dot{V} = -\varepsilon r_{\text{pol}}(I, m, T)V + q_e - q \quad (I,1.b)$$

$$\dot{T} = \beta(m)r_{\text{pol}}(I, m, T) - \gamma(m, V, T)(T - T_c) + \frac{q_e}{V} \frac{1 - \varepsilon m_e}{1 - \varepsilon m}(T_e - T) \quad (I,1.d)$$

$$\dot{\mu}_0 = r_{\mu_0}(I, m, T) + \varepsilon r_{\text{pol}}(I, m, T)\mu_0 + \frac{q_e}{V}(\mu_{0e} - \mu_0) \quad (I,1.e)$$

$$\dot{\mu}_2 = r_{\mu_2}(I, m, T) + \varepsilon r_{\text{pol}}(I, m, T)\mu_2 + \frac{q_e}{V}(\mu_{2e} - \mu_2) \quad (I,1.f)$$

Este modelo describe la velocidad de cambio de la concentración molar del iniciador (I), la concentración adimensional del monómero ($m = M/M^\circ$, siendo M y M° las concentraciones molares del monómero en la mezcla reaccionante y del monómero si estuviese puro), de la temperatura (T), del volumen (V) y de los primeros momentos (μ_0 y μ_2) de la DPM de la mezcla polimérica que se obtiene. Las entradas exógenas son el flujo molar de alimentación del iniciador (W_I), la concentración adimensional de entrada del monómero (m_e), el flujo volumétrico de entrada (q_e), el flujo volumétrico de salida (q), la temperatura del flujo de entrada (T_e), la temperatura de la chaqueta (T_c) y, las entradas de los momentos de la DPM (μ_{0e} y μ_{2e}). Las tasa de descomposición del iniciador (r_I), la tasa de polimerización (r_{pol}) y, las tasas de cambio por la reacción de los momentos 0 y 2 (r_{μ_0} y r_{μ_2}) de la DPM son funciones no lineales de I, m, T y V. β y γ son relaciones (también no lineales de m, V y T) adimensionales que representan la generación de calor y la capacidad de intercambio de calor. $\varepsilon (= 1 - \rho_m/\rho_p)$ es el factor de contracción del monómero, ρ_m es la densidad del monómero y ρ_p es la densidad del polímero; ambas se consideran constantes, aunque realmente no lo son pero su cambio en el rango de temperatura de operación de este reactor no es significativo.

La conversión del monómero (c), el peso molecular promedio en número (Mn) de la mezcla polimérica y su polidispersidad (Q) son las variables que determinan la velocidad de producción y la calidad del producto:

$$c = \frac{1 - m}{1 - \varepsilon m} \quad (I,2.a)$$

$$Mn = \frac{\rho_m(1 - m)}{\mu_0(1 - \varepsilon)} \quad (I,2.b)$$

$$Q = \left(\frac{1 - \varepsilon}{1 - m} \right)^2 \frac{\mu_0 \mu_2}{M^{\circ 2}} \quad (I,2.c)$$

Las funciones, los números adimensionales, los parámetros físicos de los reactivos, características físicas del reactor y los parámetros cinéticos se muestran en el Apéndice I.

Para terminar la descripción del reactor de polimerización, se escribe el modelo matemático del reactor en notación compacta de control moderno ya que es más adecuada de esta forma en el desarrollo de solución del problema de estimación

Para lo cual, se identifica lo siguiente:

ii) Variables de Estado. Es el conjunto de variables que, al resolver el sistema de ecuaciones del modelo matemático del proceso, especifican el sistema. Estas variables pueden ser o no ser medidas.

En nuestro sistema las variables de estado son: I, m, V, T, μ_0 y μ_2 . Se agrupan en el siguiente vector de estados:

$$x = [x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6]^T = [I, m, V, T, \mu_0, \mu_2]^T$$

ii) Variables de Entrada. Representan las acciones conocidas que el medio ejerce sobre el sistema y, en ciertos casos, pueden ser manipuladas.

En nuestro sistema se tienen ocho entradas exógenas conocidas las cuales las agruparemos en el siguiente vector de entradas:

$$u = [u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_6, u_7, u_8]^T = [q, q_e, m_e, W_I, T_e, T_c, \mu_{0e}, \mu_{2e}]^T$$

iii) Variables de Salida. Representan las acciones que el sistema ejerce sobre su medio y las podemos observar y/o medir. Para nuestro estudio, se utilizan para la estimación de otras variables que caracterizan el comportamiento dinámico del proceso.

Para nuestro sistema las mediciones en línea disponibles son:

1) Tres obtenidas de forma continua-instantánea (CI): m, V y T. La medición de “m” puede ser hecha con un densitómetro; aunque en realidad lo que se mide es la densidad de la mezcla se tiene una función de la densidad dependiente de “m”. V puede ser medido con un sensor de nivel y T puede ser medida con un termopar. Entonces, el vector de salidas CI es:

$$y_c = [y_1^c, y_2^c, y_3^c]^T = [x_2, x_3, x_4]^T = [m, V, T]^T$$

2) Dos obtenidas de forma discreta-retardada (DR): los momentos μ_0 y μ_2 de la DPM. Estos se pueden obtener de un cromatógrafo de permeación en gel (CPG) o de un cromatógrafo por exclusión de tamaño (CET) en los cuales el proceso de análisis es en lote requiriéndose un tiempo considerable. Se suponen tiempos periódicos de medición ($t_m = t_k - t_{k-1}$; t_m es el intervalo de medición, t_{k-1} es el tiempo en el cual se hace un muestreo del producto polimérico, t_k es el instante en el que se obtiene la medición). Entonces, el vector de salidas DR es:

$$y_d(t_k) = [y_1^d(t_k), y_2^d(t_k)]^T = [x_5(t_{k-1}), x_6(t_{k-1})]^T = [\mu_0(t_{k-1}), \mu_2(t_{k-1})]^T$$

Luego, en notación de variables en el espacio de estados, el modelo del reactor se puede escribir como:

$$[\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3, \dot{x}_4, \dot{x}_5, \dot{x}_6]^T = [f_1(x, u, r), f_2(x, u, r), f_3(x, u, r), f_4(x, u, r), f_5(x, u, r), f_6(x, u, r)]^T$$

donde 'r' representa el conjunto de parámetros del proceso.

Luego entonces, en notación compacta y adecuada desde el punto de estimación no lineal, el reactor se puede describir como:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f[x, u(t), r], \quad y_c = h_c(x), \quad y_d = h_d(x) \\ (x, u, r) &\in S = X \times U \times R, \quad X \subset \mathfrak{R}^6, \quad U \subset \mathfrak{R}^8 \end{aligned} \quad (1,3)$$

Por lo cual, el reactor es un sistema dinámico no-lineal con seis estados (x), ocho entradas exógenas conocidas (u) y cinco mediciones de salidas: tres CI (y_c) y dos DR (y_d). Debido a las limitaciones físicas y prácticas del reactor, el conjunto S es limitado, en donde f, h_c y h_d son campos vectoriales “suaves” (infinitamente diferenciables).

1.4 El Problema de Estimación

La meta es la de monitorear en el reactor de polimerización las variables de velocidad (c), seguridad (V y T) y calidad de producción (Mn y Q), para lo cual se necesita monitorear el estado total del reactor (Ecs. 1,1 y 1,2).

Por los dos tipos de mediciones disponibles se pueden plantear los siguientes dos problemas de estimación:

Problema 1. Obtener en línea las variables de velocidad, seguridad y calidad de producción (c, V, T, Mn y Q) a partir de las mediciones CI (m, V y T) disponibles. Este es un problema en donde se deben inferir los estados restantes del reactor no medidos (I, μ_0 y μ_2) y, si fuese el caso (en este trabajo no lo es), las mediciones disponibles se deben “ajustar” si estuviesen sujetas a errores estocásticos y/o perturbaciones del proceso.

Problema 2. Obtener en línea las variables de velocidad, seguridad y calidad de producción (c, V, T, Mn y Q) a partir de las mediciones CI (m, V y T) y de las mediciones DR (μ_0 y μ_2) disponibles. Se tiene un problema en donde se debe inferir el estado restante del reactor no medido (I) y predecir a tiempo presente los estados μ_0 y μ_2 a partir de sus mediciones DR que corresponden a tiempos pasados.

1.5 Condiciones de Operación y Comportamiento del Reactor

Se considera la homopolimerización del metil metacrilato (MMA) en masa vía radicales libres producidos por el iniciador azobis-iso-butiro-nitrilo (AIBN).

Se fijan las condiciones físicas de operación del reactor con el objeto de representar un caso drástico de una situación industrial extrema, sin considerar cualquier problema de optimización (Hernández, 1987).

$$\bar{V} = 2000 \text{ lt}, \bar{q}_e = 40 \text{ lt/min}, \bar{m}_e = 1, \bar{W}_1 = 0.08 \text{ gmol/min}, \bar{T}_e = 300 \text{ }^\circ\text{K} \text{ y } \bar{T}_c = 315 \text{ }^\circ\text{K}$$

obteniéndose los siguientes estados estacionarios:

Variable/Estado	Estable Extinción	Inestable	Inestable Ignición
I (gmol/lt)	0.00201	0.00184	0.00032
m (*)	0.9933	0.5909	0.4331
T (°K)	314.62	349.58	377.06
q (lt/min)	39.91	34.93	33.44
μ_0 (gmol/lt)	0.3639×10^{-5}	0.5227×10^{-3}	0.2399×10^{-2}
μ_2 (gmol/lt)	3494.10	96540.02	38496.11
c	0.8994×10^{-2}	0.4926	0.6379
Mn (gr/gmol)	2178827.9	962123.1	283570.7
Q (*)	2.00	2.00	2.00

Inicialmente el reactor está en su estado estacionario inestable pero con un volumen de 1500 lt, luego, en el tiempo inicial ($t_0 = 0$), el reactor se somete a una temperatura de entrada cambiante con el tiempo que lo excita totalmente,

$$T_e(t) = 300 + 10\exp(-4t/120)\text{sen}(2\pi t/60), \tag{1,4}$$

permaneciendo constantes las demás entradas del reactor. Además se fuerza al volumen del reactor a que alcance su volumen nominal (en un tiempo de 125 min.) manipulando el flujo de salida de la siguiente manera (Alvarez, 1996, 1997):

$$q(t) = q_e - \epsilon_{r_{pol}}V - (2000/125)\exp(-4t/125) \tag{1,5}$$

y de este modo tomar en cuenta el efecto de la contracción en el volumen de la mezcla.

Se puede notar que las dinámicas del reactor (Fig. 2) muestran una competencia entre los estados estables de extinción e ignición, alcanzando asintóticamente el de ignición. Se observa que la trayectoria tiene cambios abruptos y considerables y pasa por la región difícil del espacio de estados (es decir, conversión y temperatura alta, efecto gel fuerte y remoción de calor limitada).

Luego entonces, el estimador es sometido a una prueba severa.

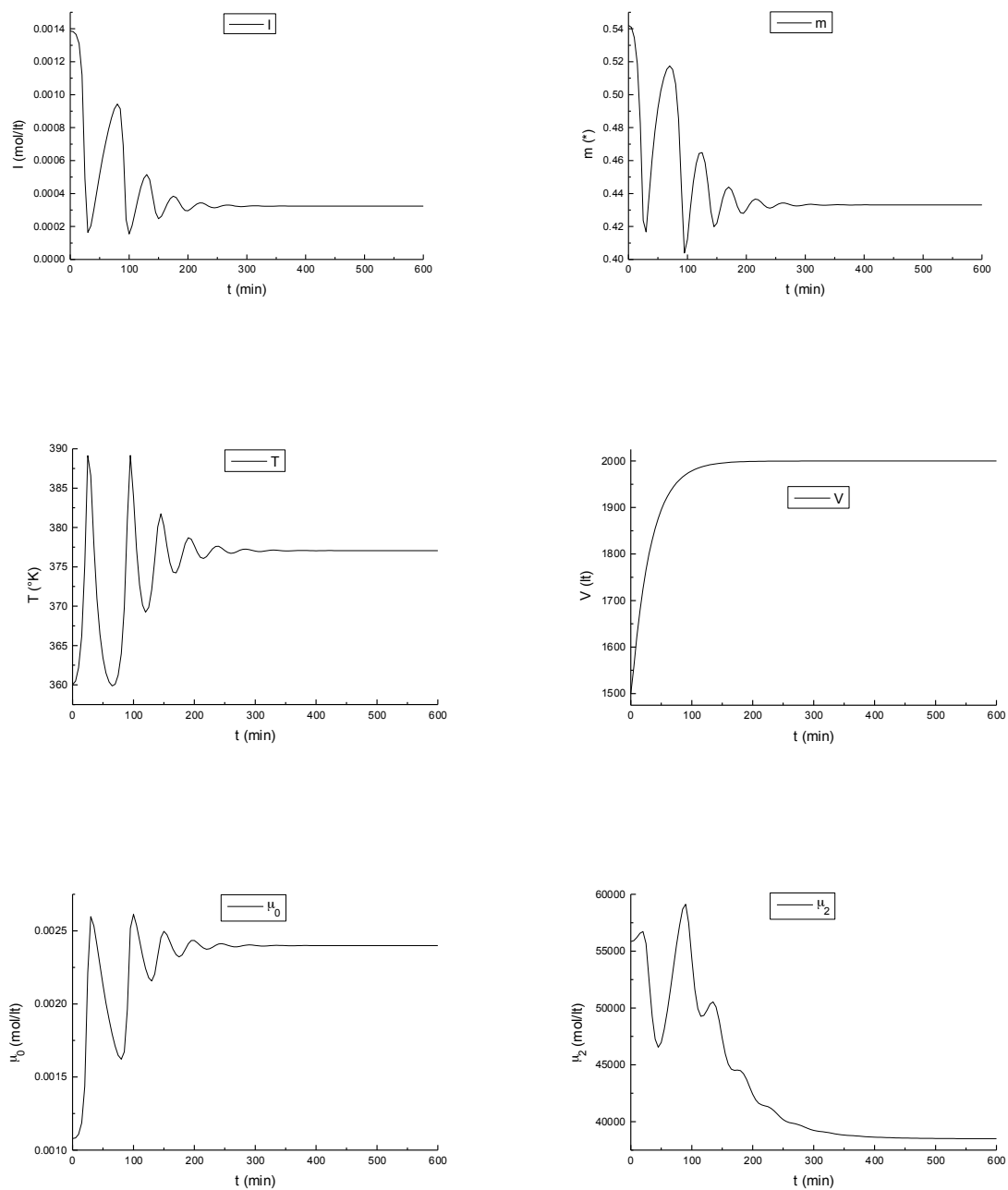


Figura 2.a. Comportamiento Dinámico del Reactor de Polimerización
Variables de Estado

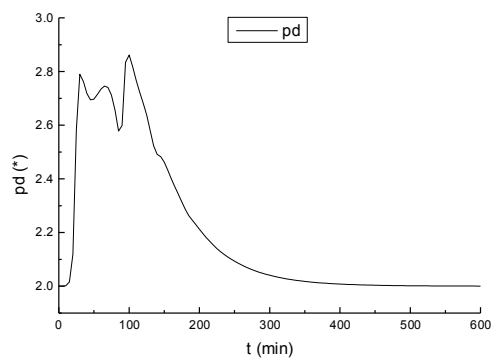
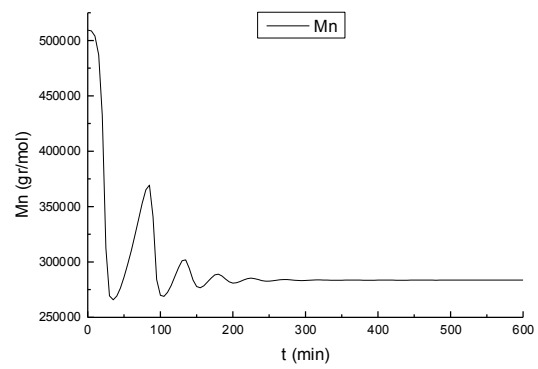
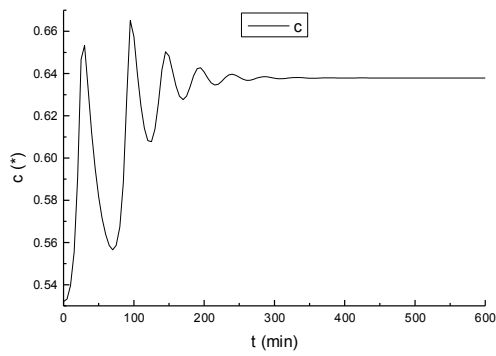


Figura 2.b. Comportamiento Dinámico del Reactor de Polimerización
Variables de Velocidad y Calidad de Producción

CAPITULO 2

PROBLEMA 1. ESTIMACION DEL REACTOR USANDO MEDICIONES CONTINUAS-INSTANTANEAS

En este capítulo se resuelve el problema de estimación del reactor del cual sólo se tienen mediciones continuas-instantáneas disponibles. Para atacar este problema se utiliza el diseño de estimación de estados de Alvarez (1997) que se presenta en el Apéndice II. La metodología, terminología y definiciones en él son usadas en lo consiguiente. Siguiendo la metodología de tal estrategia de estimación se desarrollan los siguientes pasos: prueba de estimabilidad del reactor, construcción del estimador y sintonización de las ganancias correspondientes al esquema de corrección por mediciones. Luego, se presenta, a nivel simulación, el desempeño del estimador; primero suponiendo que se cuenta con un modelo perfecto y después suponiendo un modelo con errores paramétricos. Los resultados muestran que los estimados de las variables que determinan la velocidad de producción y seguridad de operación convergen a los reales a pesar de los errores de modelado; y los estimados de las variables que determinan la calidad del producto convergen a las reales cuando se utiliza el modelo perfecto y con un sesgo, entre ellas y las reales, cuando se usa el modelo con errores paramétricos.

El objetivo de presentar este problema ya resuelto por Alvarez (1997) es el de dar un marco de referencia metodológico.

CAPITULO 2

PROBLEMA 1. ESTIMACION DEL REACTOR USANDO MEDICIONES CONTINUAS-INSTANTANEAS

Se tiene el reactor de polimerización (Ec. 1,3) y se reescribe:

$$\dot{x} = f[x, u(t), r], \quad y = h_c(x, r), \quad (x, u, r) \in S = X \times U \times R, \quad X \subset \mathfrak{R}^6, \quad U \subset \mathfrak{R}^8 \quad (2,1)$$

del que sólo se consideran las mediciones CI:

$$y_1 = m (= x_2), \quad y_2 = V (= x_3), \quad y_3 = T (= x_4), \quad y_c = [x_2, x_3, x_4]^T.$$

El problema es el de construir un estimador para inferir el estado total del reactor de polimerización para obtener finalmente las variables que determinan la velocidad (c), seguridad (V y T) y calidad (M_n y Q) de producción.

2.1 Propiedad de Estimabilidad del Reactor

Se puede ver que tres estados del reactor ya son medidos y necesitamos saber si las trayectorias de los estados restantes las podemos reconstruir. Para lo cual se verifica que el reactor cumpla la condición de estimabilidad robusta (Definición 1, Apéndice II).

Se escogen los siguientes índices de observabilidad:

$$\{\kappa_1(\text{monómero}), \kappa_2(\text{volumen}), \kappa_3(\text{temperatura})\} = \{1, 1, 1\}, \quad \kappa = 3,$$

de tal suerte que el mapa de observabilidad tiene la forma:

$$\phi_I = h_c(x) = [x_2, x_3, x_4]^T.$$

Si se elige $\phi_{II} = [x_1, x_5, x_6]^T$ como mapa no observable, el mapa de estimabilidad es la identidad permutada

$$\phi = [h_c(x), x_1, x_5, x_6]^T = [x_2, x_3, x_4, x_1, x_5, x_6]^T,$$

la cual es trivialmente R_x -invertible y no depende de las entradas $u(t)$. Además, el mapa

$$\varphi(x, x_u) = [f_2, f_3, f_4]^T, \text{ donde } x_u = u.$$

es L -continuo ya que está constituido de funciones “suaves”.

Es bien conocido que en cualquier reactor de homopolimerización vía radicales libres lo único que puede causar inestabilidad en la trayectoria del reactor es la dinámica del monómero en

el efecto gel (Alvarez, 1997). Esta dinámica no es parte de la dinámica/trayectoria no observable que esta asociada a las del iniciador y de los momentos cero y dos de la DPM:

$$[\dot{I}^*, \dot{\mu}_0^*, \dot{\mu}_2^*]^T = [f_1, f_5, f_6]^T.$$

Por lo tanto las trayectorias no observables son RE-estables.

De lo anterior, los tres requisitos de la Definición 1 se cumplen, por lo tanto, el reactor (2,1) es estimable. Ya que $\kappa < n$, se dice que las trayectorias son RE-detectables.

Entonces la planta consta de una parte observable que consta de los estados m , V y T , y una parte no observable que son los estados I , μ_0 y μ_2 .

2.2 Construcción del Estimador

El vector x_u sólo consiste de las entradas, las cuales permanecen constantes durante la operación del reactor excepto T_c . El flujo de salida es una entrada que se manipula (Ec. 1,5) y al hacerlo no se modifica la estructura de estimabilidad del reactor. Entonces, sólo se considera a T_c como el estado del exo-sistema cuya dinámica es:

$$\dot{x}_u = v(t), \quad u = x_u, \quad \text{donde} \quad x_u = T_c, \quad v(t) = \dot{T}_c \quad (2.2.a)$$

que incorporado a la planta (2,1), se obtiene la versión “aumentada” del reactor:

$$\dot{x} = f(x, x_u, r), \quad y = h_c(x, r) \quad (2.2.b)$$

Habiendo evaluado la propiedad de estimabilidad del reactor (1) se podría proseguir con la aplicación directa de (A19, Apéndice II) para la construcción del Estimador-P o de (A31, Apéndice II) para la construcción del Estimador-PI. Sin embargo se presenta el desarrollo de la construcción del estimador como un marco de referencia metodológico para el diseño y construcción del estimador del Problema 2.

Entonces, se tiene el siguiente cambio de coordenadas no lineal:

$$z = \phi_a(x, x_u), \quad \text{donde} \quad z = [z_u, z_I, z_{II}]^T, \quad \phi_a(x, x_u) = [x_u, \phi^T(x)]^T = [x_u, \phi_I^T(x), \phi_{II}^T(x)]^T \quad (2.3)$$

que aplicado a la planta aumentada (2,1), se obtiene la siguiente la forma normal del reactor en el nuevo sistema:

$$z_u = v(t), \quad u = x_u; \quad \dim z_u = p = 1 \quad (2.4.a)$$

$$z_I = \theta(z, r), \quad y = z_I; \quad \dim z_I = \kappa = 3 \quad (2.4.b)$$

$$z_{II} = w(z, r) \quad \dim z_{II} = n - \kappa = 3 \quad (2.4.c)$$

en donde

$$\theta(z, r) = \{\varphi(x, x_u)\}_{\{x=\phi^{-1}(z,r), x_u=z_u\}}$$

$$w(z, r) = [f_1(x, r), f_3(x, r), f_6(x, r)]^T_{\{x=\phi^{-1}(z)\}}$$

y, de los índices de estimabilidad, se obtienen las matrices: $\Gamma_u = 0$, $\Delta_u = 1$, $\Gamma_o = 0$ y $\Delta_o = I$.

La primera ecuación corresponde al sistema exógeno, la segunda ecuación corresponde a la parte observable del reactor y la tercera ecuación está asociada a las trayectorias no observables. Luego, se considera el siguiente sistema:

$$\dot{\zeta}_u = K_u(s_u)(u - \zeta_u), \quad \dim \zeta_u = p = 1 \quad (2.5.a)$$

$$\dot{\zeta}_I = \theta(\zeta, \rho) + K_o(s_o)(y - \zeta_I), \quad \dim \zeta_I = \kappa = 3 \quad (2.5.b)$$

$$\dot{\zeta}_{II} = w(\zeta, \rho), \quad \dim \zeta_{II} = n - \kappa = 3 \quad (2.5.c)$$

como estimador candidato para el reactor (2,4). El estimador (con un estimado ρ de los parámetros r) es una réplica del reactor (2,4) con corrección aditiva tipo inyección de errores de las mediciones de salidas. La primera ecuación corresponde al sistema exógeno, la segunda corresponde a la parte observable y la tercera corresponde a la parte no observable. Las matrices de ganancias de estructura diagonal $K_u(s_u)$ y $K_o(s_o)$ en forma parametrizada son:

$$K_u(s_u) = s_u k_1^u, \quad s_u > 0$$

$$K_o(s_o) = bd[s_o k_1^o, s_o k_2^o, s_o k_3^o], \quad s_o > 0$$

Ya teniendo el estimador apropiado del reactor en las coordenadas-z, lo que se necesita es transformarlo a coordenadas-x originales ($\zeta \rightarrow \chi$). Para el exosistema la transformación es simple y directa ya que $x_u = z_u$. Por lo que respecta a la estimación del reactor, se aplica la inversa de la transformación no lineal (2,3) (Apéndice II).

En coordenadas originales, el estimador toma la forma:

$$\dot{\chi}_u = k_u(u - \chi_u) \quad (2.6.a)$$

$$\dot{\chi} = f(\chi, \chi_u, \rho) + \Theta_I K_o(s_o)[y - h_c(\chi)] \quad (2.6.b)$$

en donde

$[\Theta_I, \Theta_{II}] = \phi_x^{-1}$, el Jacobiano del mapa de estimabilidad y su inversa son:

$$\phi_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \phi_x^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

y la matriz Θ_I (de dimensión 6 x 3) consiste de las primeras tres columnas de ϕ_x^{-1} .

El estimador (2,6.b) es una réplica de la planta aumenta con correcciones de tipo acción proporcional, por lo cual se le llama Estimador-P. La ecuación (2,6.a) sirve como un filtro de la entrada.

La dinámica del error de estimación se obtiene restando al estimador (2,5) la planta (2,4):

$$\dot{e}_u = -k_1^u e_u + v(t), \quad v = e_u = \chi_u - u \quad (2,7.a)$$

$$\dot{e}_I = -K_o(s_o)e_I + q_I[e, e_r, t], \quad \psi = e_I = h_c(\chi) - y \quad (2,7.b)$$

$$\dot{e}_{II} = \omega(e_{II}, t) + q_{II}[e, e_r, t] \quad (2,7.c)$$

en donde

$$q_I(e, e_r, t) = \{\theta(z + e, r + e_r) - \theta(z, r)\}_{\{z(t)\}},$$

$$q_{II}(e, e_r, t) = \{f^*(z + e, r + e_r) - f^*[(z_I, z_{II} + e_{II}), r + e_r]\}_{\{f^*=[f_1, f_3, f_6]^T, z(t)\}}.$$

v y ψ son los errores de las estimaciones de las salidas.

La dinámica está sujeta a perturbaciones exógenas (v) y retroalimentadas (q_I y q_{II}) y debe ser estable para asegurar la convergencia del estimador. En Alvarez (1997) se prueba la convergencia del estimador.

Para reducir o tratar de anular los sesgos entre el estado del estimador y el de la planta, que se producen debido a errores en los parámetros del modelo, se implementa una acción integral en el estimador. Partiendo de las coordenadas- z , se adiciona correcciones de tipo acción integral al estimador candidato (2,5.b):

$$\dot{\xi}_I = \theta(\xi, \rho) + K_o(s_o)(y - \xi_I) + K_I(s_o)\Pi_o \int_0^t (y - \xi_I) d\tau, \quad \dim \xi_I = \kappa = 3 \quad (2,8)$$

en donde la matriz de ganancias de estructura diagonal $K_I(s_o)$ en forma parametrizada es:

$$K_I(s_o) = bd[s_o^{-2}k_1^I, s_o^{-2}k_2^I, s_o^{-2}k_3^I],$$

y se tiene que $\Pi_o = [1, 1, 1]^T$.

Al transformar (2,8) a coordenadas- x originales, del mismo modo que para (2,5), se tiene que el Estimador-PI (se le llama así por su adicional acción integral) es de la forma:

$$\dot{\chi} = f(\chi, \chi_u, \rho) + \Theta_I K_o(s_o)[y - h_c(\chi)] + \Theta_I K_I(s_o) \int_0^t [y - h_c(\chi)] d\tau \quad (2,9)$$

cuya dinámica de error de estimación es:

$$\dot{e}_I = -K_o(s_o)e_I + K_I(s_o) \int_0^t e_I d\tau + q_I[e, e_r, t], \quad \psi = e_I = h_c(\chi) - y_c \quad (2,10.a)$$

$$\dot{e}_{II} = \omega(e_{II}, t) + q_{II}[e, e_r, t] \quad (2,10.b)$$

en donde los mapas no lineales q_I y q_{II} son los mismos que se describen anteriormente.

2.3 Sintonización del Estimador

Después de haber construido el estimador, el siguiente paso es el de escoger valores para los elementos de las matrices de ganancias de tal manera que el estado estimado converja al estado real del reactor.

Sin las perturbaciones v , q_I y q_{II} , de la dinámica del error de estimación del Estimador-P (2,7), se obtiene las siguientes dinámicas de referencia LNPA de primer orden de los errores de estimación de salidas:

$$\dot{v} + k_1^u v = 0 \quad (\text{entrada: } T_e) \quad (2,11.a)$$

$$\psi_j + k_j^o \psi_j = 0, \quad 1 \leq j \leq 3 \quad (\text{salidas: } m, V, T) \quad (2,11.b)$$

cuyos coeficientes son las ganancias k_1^u del exo-observador y k_j^o del Estimador-P. Dichas ganancias se deben escoger de tal manera que hagan estables las dinámicas de referencia.

De acuerdo a Alvarez (1997) (Apéndice II), se requiere que los polos (λ_u y γ_j^o) de los polinomios característicos de las dinámicas de referencia,

$$\lambda + k_1^u = 0 = (\lambda - \lambda_u) \quad (\text{entrada, } T_e) \quad (2,12.a)$$

$$\gamma_j + k_j^o = 0 = (\gamma_j - \gamma_j^o), \quad 1 \leq j \leq 3 \quad (\text{salidas: } m, V, T) \quad (2,12.b)$$

sean posicionados en el lado estable del plano complejo-s en términos de una frecuencia característica de referencia (ω_u^r y ω_j^r):

$$\lambda_u = -\omega_u^r$$

$$\gamma_j^o = -\omega_j^r$$

Comparando los coeficientes en el conjunto de dos ecuaciones (2,12), se obtienen las ganancias:

$$k_1^u = \omega_u^r \quad (\text{entrada: } T_e) \quad (2,13.a)$$

$$k_j^o = \omega_j^r, \quad 1 \leq j \leq 3 \quad (\text{salidas: } m, V, T). \quad (2,13.b)$$

Entonces, al haber fijado las frecuencias características de referencia quedan los parámetros s_u y s_o como “botones” de sintonización. En la Figura 3.a se muestra el patrón de movimiento de los polos al haber quedado fija una frecuencia característica de referencia y mover el parámetro $s_{u/o}$.

Con lo que respecta al Estimador-PI, de su dinámica de error de estimación (2,10) se obtienen las siguientes dinámicas, de segundo orden, de referencia LNPA de los errores de estimación de las salidas:

$$\Psi_j + k_j^0 \Psi_j + k_j^1 \Psi_j = 0, \quad 1 \leq j \leq 3 \quad (\text{salidas: m, V, T}) \quad (2,14)$$

en donde sus polinomios característicos:

$$\gamma_j^2 + k_j^0 \gamma_j + k_j^1 = 0 = (\gamma_j - \gamma_{j,1}^0)(\gamma_j - \gamma_{j,2}^0), \quad 1 \leq j \leq 3 \quad (\text{salidas: m, V, T}) \quad (2,15)$$

deben de tener sus polos en el lado estable del plano complejo, específicamente sus dos polos deben ser complejos conjugados con una frecuencia característica de referencia y un factor de amortiguamiento lo suficientemente grande:

$$\gamma_{j,i}^0 = -\omega_j^r (\xi_j \pm \sqrt{\xi_j^2 - 1}), \quad 1 \leq j \leq 3, \quad i = 1, 2. \quad (2,16)$$

De la comparación de los coeficientes del conjunto de dos ecuaciones (2,15) se obtienen las siguientes ganancias:

$$k_j^0 = 2\xi_j \omega_j^r, \quad k_j^1 = (\omega_j^r)^2, \quad 1 \leq j \leq 3 \quad (\text{salidas: m, V, T}) \quad (2,17)$$

Al igual que en el caso del Estimador-P, queda solo el parámetro s_0 para mover y ajustar para hacer converger al estimador. En la Figura (3.b) se muestra el patrón de movimiento de los polos cuando se mueve el parámetro s_0 y se fijan la frecuencia característica de referencia y el factor de amortiguamiento.

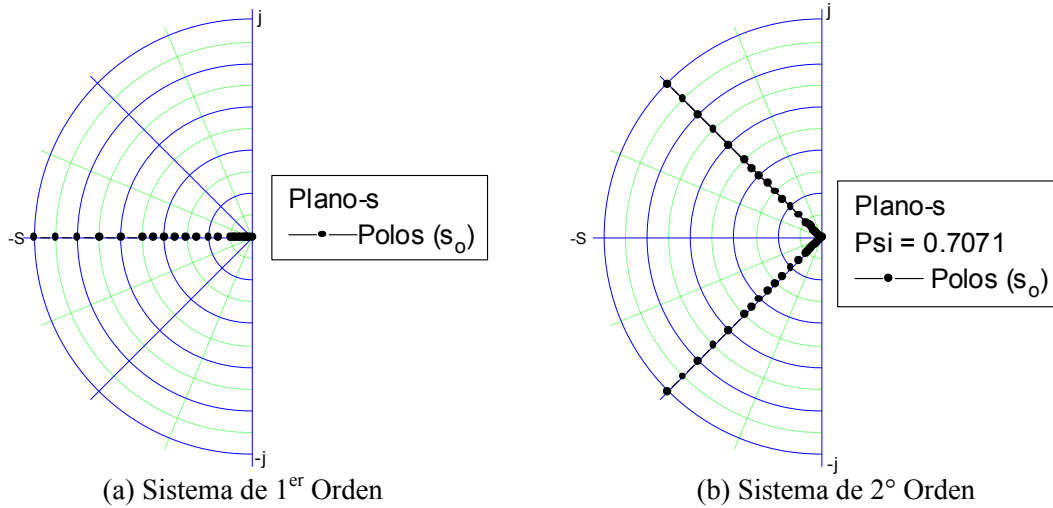


Figura 3. Patrón de Movimiento de Polos al Mover el Parámetro s_0

2.4 Desempeño del Estimador

De estudios previos de dinámica y control en este mismo reactor (Alvarez y col., 1990, 1994) se tiene lo siguiente: a condiciones nominales de T y V el tiempo de asentamiento de la dinámica del monómero es de aproximadamente 125 min; a condiciones nominales de I, m y V el tiempo de asentamiento de la dinámica de la temperatura es aproximadamente de 75 min. Se establece un tiempo de asentamiento del volumen de 50 min y, para filtrar la entrada T_e se establece un tiempo de asentamiento escalado de 3 min. Y el factor de amortiguamiento recomendable es de 0.71. De lo anterior se adoptan los siguientes tiempos de asentamiento de referencia:

$$\{\tau_1^r, \tau_2^r, \tau_3^r; s_u \tau_u^r\} = \{125, 50, 75; 3\}, \quad \xi_{1/2/3} = 0.71.$$

En donde, para una dinámica de primer orden (2,11), la frecuencia característica en términos del tiempo de asentamiento está dada por:

$$\omega_j^r = \frac{4}{\tau_j^r}$$

y para una dinámica de segundo orden (2,14), la frecuencia característica es dada por:

$$\omega_j^r = \frac{4}{\xi_j \tau_j^r}.$$

Las condiciones iniciales del estimador son:

$$[x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6]_0 = [0.001 \text{ g/mol/lit}, 0.575, 350 \text{ °K}, 1560 \text{ lit}, 0.00085 \text{ g/mol/lit}, 65000 \text{ g/mol/lit}]$$

las cuales no son cercanas a las del reactor.

Se hicieron varias corridas del Estimador-P con modelo perfecto para diferentes valores de s_0 , encontrando que para valores mayores que 5 el estimador converge aceptablemente y, al igual que en los estudios previos (Alvarez, 1997) se escoge $s_0 = 10$ como el valor mas apropiado.

La Figura 4 muestra el desempeño del Estimador-P con modelo perfecto, siendo las curvas marcadas con (*) la evolución del reactor y las curvas marcadas con (o) la trayectoria del estimador. De ella se puede observar lo siguiente: (i) todos las variables estimadas y las del reactor convergen asintóticamente al mismo estado estacionario, esto es porque los modelos del reactor y del estimador son iguales, (ii) los tiempos de asentamiento de convergencia de las variables I (≈ 25 min), m ó c (≈ 20 min), T (≈ 20 min) son más pequeños (rápidos) que las variables μ_0 (≈ 200 min) y μ_2 (≈ 150 min) que definen las variables de calidad: M_n ($= 180$ min) y Q ($= 220$ min).

Luego, ya que en la práctica es casi imposible obtener un modelo “perfecto” para el estimador sino uno aproximado, se simula este caso proponiendo los siguientes errores en los parámetros del: al parámetro E_p/R (que corresponde a la energía de activación en la etapa de propagación) se le da un valor de 2250.00 en vez de 2190.74 cal (que se supone el real); al parámetro a_h (que corresponde a la constante adimensional de proporcionalidad de la función de intercambio de calor) se le da un valor de 0.67 en vez de 0.74, y al parámetro f_i (que corresponde al factor de eficiencia de generación de radicales libres en la etapa de disociación) se le da un valor de 0.55 en vez de 0.58. Estos errores en los parámetros provocan: una subestimación de aproximadamente el 16% de la velocidad de propagación del calor producido por la reacción; una subestimación de aproximadamente el 10% de la capacidad de remoción de calor, y un 5% de subestimación de la eficiencia del iniciador.

En la Figura 5 se muestra el desempeño del Estimador-P con errores en el modelo, implementado con las mismas ganancias de la corrida de la Figura 4. Se puede observar que las variables estimadas de I , m , c , T , y V convergen con un pequeño sesgo con respecto a las del reactor y, aunque convergen las variables estimadas de μ_0 y μ_2 (o M_n y Q) (que corresponden a la dinámica inobservable) el sesgo con respecto a las reales es grande.

Entonces para reducir el sesgo, se implementa el Estimador-PI sintonizando sus ganancias con los mismos tiempos de asentamiento del Estimador-P y el mismo valor para s_0 ($=10$).

En la Figura 6 se muestra el desempeño del Estimador-PI con el modelo con errores en los parámetros, en ella se puede observar que el sesgo que había (Figura 5) en las variables I , m , c , T y V se anuló y además los tiempo de asentamiento de la convergencia de estas variables estimadas a las reales son más pequeños (≈ 25 , 10, 10 y 5 min, respectivamente) que en el Estimador-P con modelo “perfecto” (Figura 4). Sin embargo, con las variables estimadas de μ_0 y μ_2 (o M_n y Q) todavía existe un sesgo apreciable aunque se redujo un poco con respecto al estimador de la Figura 5.

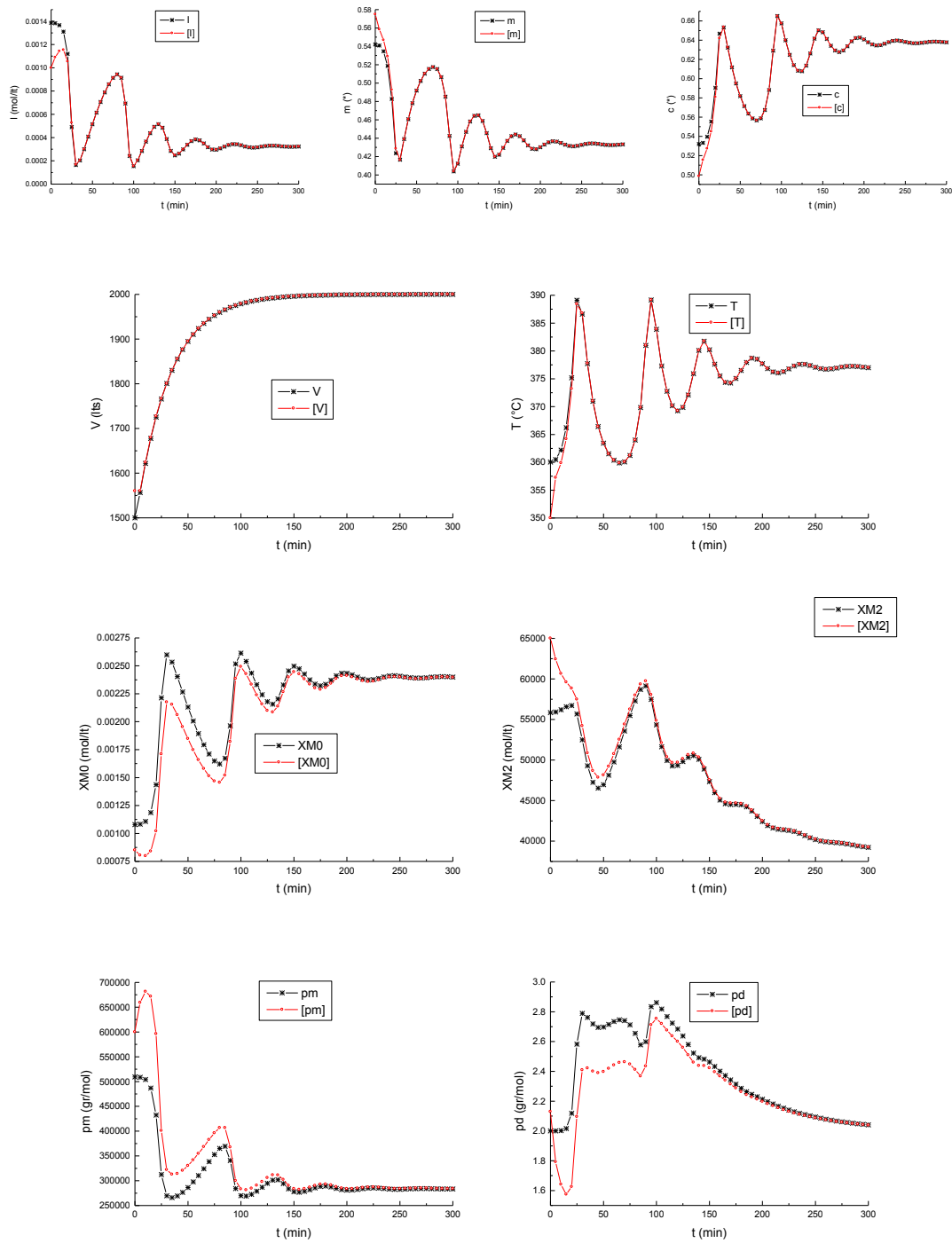


Figura 4. Desempeño del Estimador-P con Modelo Perfecto, $s_0 = 10$.

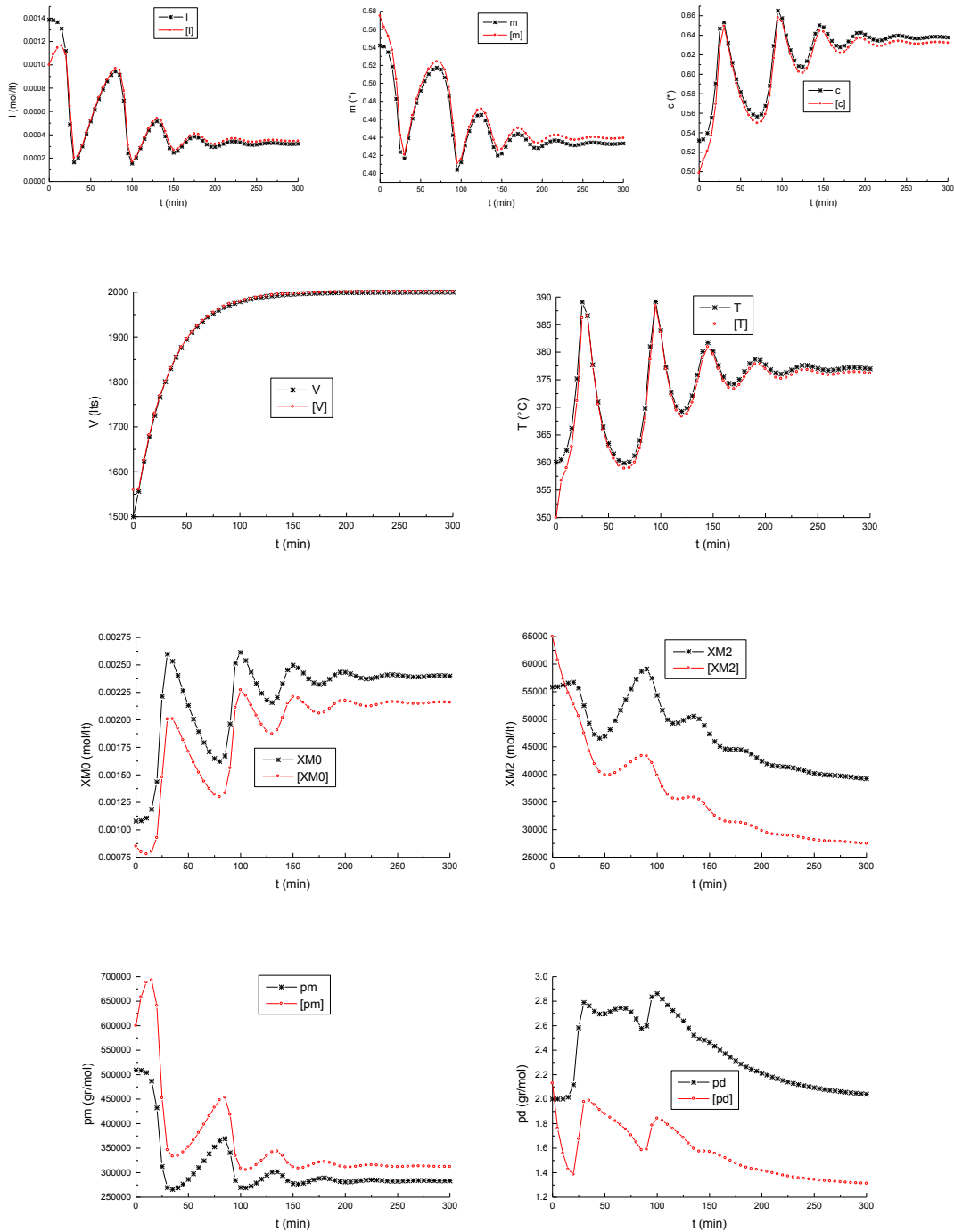


Figura 5. Desempeño del Estimador-P con Error en Parámetros del Modelo.

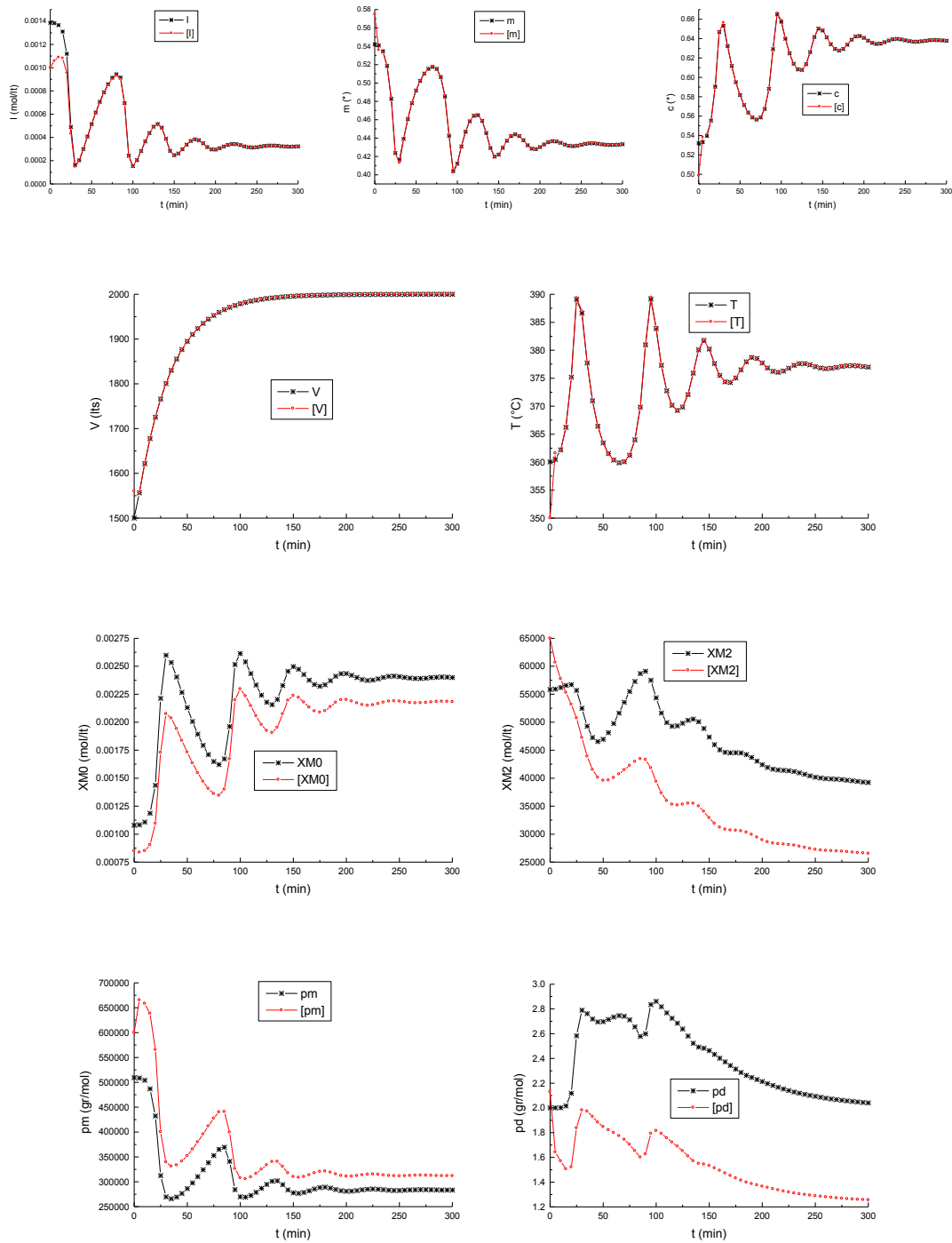


Figura 6. Desempeño del Estimador-PI con Error en Parámetros del Modelo

2.5 Observaciones

Como ya se mencionó, en (Alvarez, 1997) ya se solucionó este problema de estimación. En su esquema de estimación se escogen los siguientes índices de estimabilidad:

$$\{\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3\} = \{2, 1, 1\}.$$

Converge rápidamente a pesar de errores de modelado y se obtienen pequeños sesgos en las variables estimadas de μ_0 y μ_2 (o M_n y Q), los cuales se dice que son aceptables desde un punto de vista práctico ya que están dentro de la desviación estándar que presentan los aparatos de medición en línea.

El desempeño del estimador construido por Alvarez es mejor que el que aquí se presenta. A sabiendas que con el conjunto de índices de estimabilidad de Alvarez se obtiene un mejor desempeño, los índices que se presentan y escogen aquí son utilizados para la construcción del estimador del siguiente problema en el entendido de que se someterá a una prueba más drástica el estimador a construir y de que si funciona para estos índices, funcionará mejor con el otro conjunto.

CAPITULO 3

PROBLEMA 2. ESTIMACION DEL REACTOR USANDO MEDICIONES CONTINUAS-INSTANTANEAS Y DISCRETAS-RETARDADAS

En este Capítulo, finalmente se diseña el estimador en el que se pueden usar también mediciones DR. Esto es lo que constituye la aportación del presente trabajo de investigación. La construcción del estimador se basa en la propiedad de estimabilidad de Alvarez (1997) (Apéndice II). Para iniciar se verifica que el reactor cumpla con la condición de estimabilidad en el sentido de Alvarez suponiendo que todas las mediciones son continuas. De la propiedad de estimabilidad se genera un cambio de coordenadas no lineal que lleva al modelo no lineal del reactor a una forma normal (observable-detectable) con dinámica casi-lineal para la dinámica observable del reactor, que a diferencia del problema del problema anterior, esta dinámica consta de una parte asociada a las mediciones CI y otra asociada a las mediciones DR. El esquema de corrección por mediciones CI es el que se construyó en el capítulo anterior. Para la dinámica observable, asociada a las mediciones DR se diseña una versión discreta-predictiva desde el esquema de corrección continuo, que se acompaña de una dinámica discreta de error de estimación casi-lineal. De esta última, se utilizan criterios estándares de asignación de polos para sintonizar las ganancias. Por último, se presentan los resultados que muestran que el estimador converge con buen desempeño a pesar de utilizar un modelo con errores paramétricos.

CAPITULO 3

PROBLEMA 2. ESTIMACION DEL REACTOR USANDO MEDICIONES CONTINUAS-INSTANTANEAS Y DISCRETAS-RETARDADAS

Se tiene el reactor de polimerización (I,3), el cual se reescribe:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f[x, u(t), r], \quad y_c = h_c(x), \quad y_d(t_k) = h_d[x(t_{k-1})] \\ (x, u, r) &\in S = X \times U \times R, \quad X \subset \mathfrak{R}^6, \quad U \subset \mathfrak{R}^8 \end{aligned} \quad (3,1)$$

Se recuerda que se tienen dos tipos de mediciones disponibles:

i) tres mediciones CI:

$$y_1^c = m (= x_2), \quad y_2^c = V (= x_3), \quad y_3^c = T (= x_4), \quad y_c = [x_2, x_3, x_4]^T$$

ii) dos mediciones DR:

$$y_1^d(t_k) = \mu_0(t_{k-1}) = [x_5(t_{k-1})], \quad y_2^d(t_k) = \mu_2(t_{k-1}) = [x_6(t_{k-1})], \quad y_d(t_k) = [x_5(t_{k-1}), x_6(t_{k-1})]^T$$

Los momentos de la DPM se pueden medir con un GPC o un CET, sin embargo los datos que se obtienen son discretos y con retardo (Figura 7). Se supone que las mediciones se realizan de forma periódica a intervalos de tiempo iguales ($t_m = t_k - t_{k-1}$).

Se puede notar que se miden directamente cinco de los seis estados del reactor: tres estados de forma CI (m, V y T) y; dos estados de forma DR (μ_0 y μ_2). Por lo tanto, el problema de estimación que se tiene es el de inferir el estado restante que no se mide (I) y predecir a tiempo presente en forma continua los estados del reactor cuyas mediciones son de tiempos pasados y de tipo discreto. Reconstruido el estado total del reactor se obtienen finalmente las variables que determinan la velocidad (c), seguridad (V y T) y calidad (Mn y Q) de producción.

3.1 Propiedad de Estimabilidad del Reactor

Primero supongamos que todas las mediciones son continuas con el objeto de evaluar la estimabilidad del reactor:

$$y_c(t) = h_c(x), \quad y_d(t) = h_d(x) \quad y = [h_c(x), h_d(x)]^T. (= [x_2, x_3, x_4, x_5, x_6]^T)$$

Se escogen los siguientes índices de observabilidad:

$$\{\kappa_1(m), \kappa_2(V), \kappa_3(T)\} = \{1, 1, 1\}, \quad \{\kappa_4(\mu_0), \kappa_5(\mu_2)\} = \{1, 1\}, \quad \kappa = \kappa_1 + \dots + \kappa_5 = 5,$$

de tal suerte que el mapa de observabilidad tiene la forma:

$$\phi_I = [h_c(x), h_d(x)]^T = [x_2, x_3, x_4, x_5, x_6]^T.$$

Si se elige $\phi_{II} = [x_1]$ como mapa no observable, el mapa de estimabilidad es la identidad permutada

$$\phi = [h_c(x), h_d(x), x_1]^T = [x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_1]^T,$$

la cual es trivialmente Rx-invertible y no depende de las entradas $u(t)$. Además, el mapa

$$\varphi(x, x_u) = [f_2, f_3, f_4, f_5, f_6]^T, \text{ donde } x_u = u.$$

es L-continuo ya que está constituido de funciones “suaves”.

Es bien conocido que en cualquier reactor de homopolimerización vía radicales libres lo único que puede causar inestabilidad en la trayectoria del reactor es la dinámica del monómero en el efecto gel (Alvarez, 1997). Esta dinámica no es parte de la dinámica/trayectoria no observable que esta asociada a las del iniciador y de los momentos cero y dos de la DPM:

$$[I^*] = [f_1].$$

Por lo tanto la trayectoria no observable es RE-estable.

De lo anterior, los tres requisitos de la Definición 1 se cumplen, por lo tanto, el reactor (3,1) es estimable. Ya que $\kappa < n$, se dice que las trayectorias son RE-detectables.

Entonces, ahora la planta consta de una parte observable que consta de los estados m, V, T, μ_0 y μ_2 . y una parte no observable que es el estado I . Donde m, V y T están asociadas a sus mediciones CI y μ_0 y μ_2 están asociadas a sus mediciones DR.

3.2 Construcción del Estimador

Como ya se mencionó en el capítulo anterior, de las condiciones de operación del reactor y del mapa de estimabilidad, x_u consiste solo de T_e y se le puede considerar como el estado de un exo-sistema accionado por la entrada exógena $v(t)$ y que incorporando a la planta (3,1) se obtiene su versión *aumentada*:

$$\dot{x}_u = v(t), \quad u = x_u, \quad \text{donde} \quad x_u = T_e, \quad v(t) = T_e \quad (3.2.a)$$

$$\dot{x} = f(x, x_u, r), \quad y_c = h_c(x), \quad y_d(t_k) = h_d(x(t_{k-1})) \quad (3.2.b)$$

Pero ahora, atendiendo a los dos tipos de mediciones: $mc(=3)$ mediciones CI (y_c) y $md(=2)$ DR (y_d), subdividamos los índices de estimabilidad en dos conjuntos:

$$(\kappa_1^c, \kappa_2^c, \kappa_3^c) = (1, 1, 1), \quad (\kappa_1^c + \dots + \kappa_{mc}^c = \kappa_c = 3), \quad \text{que corresponde a las mediciones CI y}$$

$$(\kappa_1^d, \kappa_2^d) = (1, 1), \quad (\kappa_1^d + \dots + \kappa_{md}^d = \kappa_d = 2) \quad \text{que corresponde a las mediciones DR}$$

Tal que $\kappa_c + \kappa_d = \kappa$. Consecuentemente, ahora el mapa de observabilidad es de la forma $\phi_I = (\phi_I^c, \phi_I^d)^T$ y el mapa φ es de la forma $\varphi = (\varphi_c, \varphi_d)^T$, en donde ϕ_I^c y φ_c corresponden a las mediciones CI y, ϕ_I^d y φ_d a las mediciones DR.

$$\phi_I = (\phi_I^c, \phi_I^d)^T = ((x_2, x_3, x_4)^T, (x_5, x_6)^T)^T.$$

$$\varphi(x, x_u) = (\varphi_c^T(x, x_u), \varphi_d^T(x, x_u))^T = ((f_2, f_3, f_4)^T, (f_5, f_6)^T)^T,$$

Con el cambio de coordenadas no lineal (asociado a la propiedad de estimabilidad)

$$z = [z_u, z_I^c, z_I^d, z_{II}]^T = [x_u, \phi_I^c, \phi_I^d, \phi_{II}]^T$$

(todavía suponiendo continuas todas las mediciones), la planta aumentada (3,2) toma la siguiente forma normal en el nuevo sistema de coordenadas:

$$z_u = v(t), \quad u = x_u; \quad \dim z_u = p = 1 \quad (3,3.a)$$

$$z_I^c = \theta_c(z, r), \quad y_c = z_I^c; \quad \dim z_I^c = \kappa_c = 3 \quad (3,3.b)$$

$$z_I^d = \theta_d^*(z, r), \quad y_d(t_k) = z_I^d(t_{k-1}), \quad \dim z_I^d = \kappa_d = 2 \quad (3,3.c)$$

$$z_{II} = w(z, r) \quad \dim z_{II} = n - \kappa = 1 \quad (3,3.d)$$

en donde

$$\theta_c(z, r) = \{\varphi_c(x, x_u)\}_{\{x=\phi^{-1}(z,r), x_u=z_u\}}, \quad \theta_d^*(z, r) = \{\varphi_d(x)\}_{\{x=\phi^{-1}(z,r)\}}, \quad w(z, r) = f_I(x)_{\{x=\phi^{-1}(z,r)\}}$$

y de los índices de estimabilidad, se obtienen las matrices: $\Gamma_u = 0$ y $\Delta_u = 1$ para (2.a); $\Gamma_o^c = 0$ y $\Delta_o^c = I$ para (3,3.b); $\Gamma_o^d = 0$ y $\Delta_o^d = I$ para (3,3.c).

La primera ecuación corresponde al sistema exógeno, la segunda ecuación corresponde a la parte observable relacionada a las mediciones CI y tercera ecuación corresponde a la parte observable relacionada a las mediciones DR y la cuarta está asociada a la trayectoria no observable. Sin embargo la Ec. (3,3.c) se debe escribir en su versión discreta para poder atender de manera adecuada sus mediciones de naturaleza DR, por lo cual toma la forma:

$$z_I^d(t_k) = \Omega z_I^d(t_{k-1}) + \int_{t_{k-1}}^{t_k} \Omega \theta_d^*(z, r) d\tau, \quad \dim z_I^d = \kappa_d = 2 \quad (3,4)$$

en donde $\Omega = \exp(\Gamma_o^d t_m)$ es la matriz de transición.

Se reescribe el sistema (3,3) ahora en lo que se le llamará su versión continua-discreta:

$$z_u = v(t), \quad u = x_u; \quad \dim z_u = p = 1 \quad (3,5.a)$$

$$z_I^c = \theta_c(z, r), \quad y_c = z_I^c; \quad \dim z_I^c = \kappa_c = 3 \quad (3,5.b)$$

$$z_I^d(t_k) = z_I^d(t_{k-1}) + \theta_d(z, r), \quad y_d(t_k) = z_I^d(t_{k-1}), \quad \dim z_I^d = \kappa_d = 2 \quad (3,5.c)$$

$$z_{II} = w(z, r) \quad \dim z_{II} = n - \kappa = 1 \quad (3,5.d)$$

en donde

$$\theta_d(z, r) = \int_{t_{k-1}}^{t_k} \{\varphi_d(x)\}_{x=\varphi^{-1}(z,r)} d\tau, \text{ y se tienen las matrices } \Omega = I \text{ y } \Delta_o^d = I \text{ para (3,5.c).}$$

Para las dos primeras ecuaciones diferenciales se conserva la misma estructura del sistema aumentado para el tratamiento del caso en el cual se usan solo mediciones CI (Capítulo 2).

3.2.1 El Estimador-P

Los pares de matrices (Γ_u, Δ_u) de Ec. (3,5.a), (Γ_o^c, Δ_o^c) de Ec. (3,5.b) y (Ω, Δ_o^d) de Ec. (3,5.c) cumplen con la condición de observabilidad lineal (Kwakernaak, 1972), y la dinámica no observable (3,5.d) es estable y los mapas θ_c y θ_d son L-continuos (porque φ lo es). En vista de esto, consideremos

$$\zeta_u = K_u(s_u)(u - \zeta_u), \quad \dim \zeta_u = p = 1 \quad (3,6.a)$$

$$\zeta_I^c = \theta_c(\zeta, \rho) + K_o^c(s_o^c)(y_c - \zeta_I^c), \quad \dim \zeta_I^c = \kappa_c = 3 \quad (3,6.b)$$

$$\zeta_I^d(t_k) = \zeta_I^d(t_{k-1}) + \theta_d(\zeta, \rho) + K_o^d[y_d(t_k) - \zeta_I^d(t_{k-1})], \quad \dim \zeta_I^d = \kappa_d = 2 \quad (3,6.c)$$

$$\zeta_{II} = w(\zeta, \rho) \quad \dim \zeta_{II} = n - \kappa = 1 \quad (3,6.d)$$

como estimador para la planta (3,5). Al igual que en el capítulo anterior, el estimador (con un estimado ρ del parámetro r) es una réplica de la planta (3,5) con corrección aditiva tipo “inyección de errores de mediciones de salidas”. El estimador tiene acción proporcional (2° término en 3,5.a, 3° en 3,5.b y 3° en 3,5.c). La primera y segunda ecuaciones diferenciales corresponden a la parte observable continua, la tercera ecuación en diferencias corresponde a la parte observable discreta y la cuarta ecuación diferencial corresponde a la parte no observable continua de la planta. Las matrices de ganancias $K_u(s_u)$, $K_o^c(s_o^c)$ en forma parametrizada y con estructura diagonal, que resulta del diseño del caso continuo del estimador (Capítulo 2), son:

$$K_u(s_u) = s_u k_1^u, \quad s_u > 0$$

$$K_o^c(s_o^c) = bd[s_o^c k_1^{oc}, s_o^c k_2^{oc}, s_o^c k_3^{oc}], \quad s_o^c > 0$$

cuyos elementos $k_j^{u/oc}$, ó lo que es lo mismo, los elementos de $K_u(1)$ y $K_o^c(1)$ son tales que las dinámicas de referencia LNPA de los errores de estimación de salidas,

$$v_j + k_1^u v = 0, \quad (\text{entrada}) \quad (3,7.a)$$

$$\psi_j^c + k_j^{oc} \psi_j^c = 0, \quad 1 \leq j \leq 3 \quad (\text{monómero, volumen y temperatura}) \quad (3,7.b)$$

son estables (Capítulo 2). s_u y s_o^c son parámetros ajustables que se escogen suficientemente grandes para asegurar la convergencia del estimador (Capítulo 2).

Para terminar la descripción del estimador, se ha de decir que K_o^d es una matriz de ganancias para la acción proporcional de la parte discreta del estimador. La motivación y derivación de la forma de las matrices de ganancias de la parte continua se puede ver en (Alvarez, 1997) y la caracterización de la matriz de ganancias para la parte discreta constituye una de las aportaciones centrales del presente trabajo y el material correspondiente se trata en la siguiente sección.

Ahora es conveniente, escribir el estimador (3,6) de la planta continua-discreta (3,5) en su versión totalmente continua:

$$\dot{\zeta}_u = K_u(s_u)(u - \zeta_u), \quad \dim \zeta_u = p = 1 \quad (3,8.a)$$

$$\dot{\zeta}_I^c = \theta_c(\zeta, \rho) + K_o^c(s_o^c)(y_c - \zeta_I^c), \quad \dim \zeta_I^c = \kappa_c = 3 \quad (3,8.b)$$

$$\dot{\zeta}_I^d = \theta_d(\zeta, \rho) + \sum_{k=1}^{\infty} K_o^d[y_d(t_k) - \zeta_I^d(t_{k-1})]\delta^*(t - t_k), \quad \dim \zeta_I^d = \kappa_d = 2 \quad (3,8.c)$$

$$\dot{\zeta}_{II} = w(\zeta, \rho) \quad \dim \zeta_{II} = n - \kappa = 1 \quad (3,8.d)$$

en donde

$\delta^*(t - t_k)$ es la funcional delta de Dirac.

La Ec. (3,8.c) es equivalente (en forma continua) de la Ec. (3,6.c) en forma discreta, en donde se puede observar que las acciones de corrección por mediciones discretas son en forma de pulsos.

En coordenadas originales (χ, χ_u) , el estimador (3,8) toma la forma (que se le llamara Estimador-P por su acción proporcional de corrección):

$$\dot{\chi}_u = k_u(u - \chi_u) \quad (3,9.a)$$

$$\dot{\chi} = f(\chi, \chi_u, \rho) + \Theta_I^c K_o^c(s_o^c)[y_c - h_c(\chi)] + \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \Theta_{II}^d K_o^d[y_d(t_k) - h_d(\chi(t_{k-1}))] \right\} \delta^*(t - t_k) \quad (3,9.b)$$

en donde

$[\Theta_I^c, \Theta_I^d, \Theta_{II}] = \phi_x^{-1}$, el Jacobiano del mapa de estimabilidad y su inversa son matrices de identidad permutadas:

$$\phi_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \phi_x^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix};$$

la matriz Θ_I^c (de dimensión 6x3) consiste de las primeras tres columnas de ϕ_x^{-1} , la matriz Θ_I^d (de dimensión 6x2) consiste de la cuarta y quinta columnas de ϕ_x^{-1} .

Observe que el estimador es una réplica de la planta aumentada (3,2) con correcciones del tipo proporcional (1^{er} término en 3,9.a, 2^o y 4^o términos en 3,9.b). El estimador es accionado por las señales CI de $u(t)$ e $y_c(t)$, y por las mediciones DR $y_d(t_k)$, e infiere una trayectoria $\chi(t)$ que se quiere RE-converja a la trayectoria de la planta $x(t)$. La ecuación (3,9.a) sirve como un filtro de la entrada.

Restando al estimador (3,6) la planta (3,5) nos da la dinámica del error de estimación:

$$\dot{e}_u = -k_1^u e_u + v(t), \quad v = e_u = \chi_u - u \quad (3,10.a)$$

$$\dot{e}_1^c = -K_o^c(s_o^c)e_1^c + q_1^c[e, e_r, t], \quad \psi_c = e_1^c = h_c(\chi) - y_c \quad (3,10.b)$$

$$e_1^d(t_k) = (I - K_o^d)e_1^d(t_{k-1}) + q_1^d[e, e_r, t_m], \quad \psi_d(t_k) = e_1^d(t_{k-1}) \quad \psi_d(t_k) = h_d[\chi(t_{k-1})] - y_d(t_k) \quad (3,10.c)$$

$$\dot{e}_{II} = \omega(e_{II}, t) + q_{II}[e, e_r, t] \quad (3,10.d)$$

en donde

$$\zeta = z + e, \quad \rho = r + e_r,$$

$$q_1^c(e, e_r, t) = \{\theta_c(z + e, r + e_r) - \theta_c(z, r)\}_{\{z(t)\}},$$

$$q_1^d(e, e_r, t_m) = \{\theta_d(z + e, r + e_r) - \theta_d(z, r)\}_{\{z(t)\}},$$

$$q_{II} = (e, e_r, t) = \{f_1(z + e, r + e_r) - f_1(z_1, z_{II} + e_{II}), r + e_r\}_{\{z(t)\}}$$

La dinámica está sujeta a perturbaciones exógenas (v) y retroalimentadas ($q_1^{c/d}$, q_{II}) y debe ser estable para asegurar la convergencia del estimador. La prueba de convergencia está fuera del límite del presente trabajo, por lo que se circunscribe a proceder a la sintonización como una extensión metodológica de la sintonización del caso continuo (Alvarez, 1997) donde sí se cuenta con prueba de convergencia.

3.2.2 El Estimador-PI

Como ya se mencionó anteriormente, el modelo no es exacto y para hacer frente a los inexorables errores paramétricos del modelo se recomienda implementar acción integral en el estimador. Al implementar tal acción, resulta el siguiente sistema:

$$\dot{\zeta}_1^c = \theta_c(\zeta, \rho) + K_o^c(s_o^c)(y_c - \zeta_1^c) + K_1^c(s_1^c)\Pi_o^c \int_0^t (y_c - \zeta_1^c) d\tau, \quad \dim \zeta_1^c = \kappa_c = 3 \quad (3,11.a)$$

$$\zeta_1^d(t_k) = \zeta_1^d(t_{k-1}) + \theta_d(\zeta, \rho) + K_o^d[y_d(t_k) - \zeta_1^d(t_{k-1})] + K_1^d t_m \Pi_o^d \sum_{i=1}^k [y_d(t_i) - \zeta_1^d(t_{i-1})], \quad \dim \zeta_1^d = \kappa_d = 2 \quad (3,11.b)$$

$$\dot{\zeta}_{II} = w(\zeta, \rho) \quad \dim \zeta_{II} = n - \kappa = 1 \quad (3,11.c)$$

en donde

$$\Pi_o^c = [1, 1, 1]^T \quad \text{y} \quad \Pi_o^d = [1, 1]^T,$$

como estimador para la planta (3,5). El estimador tiene acción proporcional (3^o en 3,11.a y 3^o en 3,11.b) y, para compensar efectos de errores de modelado, tiene acción integral (4^o término en

3,11.a) y sumatorio (4° término en 3,11.b). Las matrices de ganancias $K_o^c(s_o^c)$ y $K_I^c(s_o^c)$ en forma parametrizada y con estructura diagonal, que resulta del diseño del caso continuo del estimador (Capítulo 2), son:

$$K_o^c(s_o^c) = \text{bd}[s_o^c k_1^{oc}, s_o^c k_2^{oc}, s_o^c k_3^{oc}],$$

$$K_I^c(s_o^c) = \text{d}[s_o^{c2} k_1^{lc}, s_o^{c2} k_2^{lc}, s_o^{c2} k_3^{lc}], \quad s_o^c > 0$$

cuyos elementos k_j^{oc} y k_j^{lc} , ó lo que es lo mismo, los elementos de $K_o^c(1)$ y $K_I^c(1)$ son tales que las dinámicas de referencia LNPA de los errores de estimación de salidas,

$$\Psi_j^c + k_j^{oc} \Psi_j^c + k_j^{lc} \Psi_j^c = 0, \quad 1 \leq j \leq 3 \quad (\text{monómero, volumen y temperatura})$$

(3,12)

son estables (Capítulo 2). Quedando s_o^c como parámetro ajustable. K_I^d es la matriz de ganancias, para la acción sumatorial de la parte discreta del estimador y será caracterizada en la siguiente sección.

La versión totalmente continua del estimador (3,11) es:

$$\dot{\zeta}_I^c = \theta_c(\zeta, \rho) + K_o^c(s_o^c)(y_c - \zeta_I^c) + K_I^c(s_o^c) \Pi_o^c \int_0^t (y_c - \zeta_I^c) d\tau, \quad \dim \zeta_I^c = \kappa_c = 3 \quad (3,13.a)$$

$$\zeta_I^d = \theta_d(\zeta, \rho) + \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ K_o^d [y_d(t_k) - \zeta_I^d(t_{k-1})] + K_I^d t_m \Pi_o^d \sum_{i=1}^k [y_d(t_i) - \zeta_I^d(t_{i-1})] \right\} \delta^*(t - t_k), \quad \dim \zeta_I^d = \kappa_d = 2 \quad (3,13.b)$$

$$\zeta_{II} = w(\zeta, \rho) \quad \dim \zeta_{II} = n - \kappa = 1 \quad (3,13.c)$$

En coordenadas originales (χ, χ_u) , el Estimador-PI toma la forma:

$$\dot{\chi} = f(\chi, \chi_u, \rho) + \Theta_I^c K_o^c(s_o^c) [y_c - h_c(\chi)] + \Theta_I^c K_I^c(s_o^c) \int_0^t [y_c - h_c(\chi)] d\tau$$

$$+ \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \Theta_{II}^d K_o^d [y_d(t_k) - h_d(\chi(t_{k-1}))] + \Theta_{II}^d K_I^d t_m \sum_{i=1}^k [y_d(t_i) - h_d(\chi(t_{i-1}))] \right\} \delta^*(t - t_k) \quad (3,14)$$

El Estimador-PI es una réplica de la planta aumentada (3,2) con correcciones del tipo proporcional (2° y 4°), integral (3er término) y sumatorio (4° término).

La dinámica del error de estimación del Estimador-PI, que se obtiene al restar al estimador (3,11) la planta (3,5), es:

$$\dot{e}_I^c = -K_o^c(s_o^c) e_I^c + K_I^c(s_o^c) \int_0^t e_I^c d\tau + q_I^c [e, e_r, t], \quad \psi_c = e_I^c = h_c(\chi) - y_c \quad (3,15.a)$$

$$e_I^d(t_k) = (I - K_o^d) e_I^d(t_{k-1}) - K_I^d \sum_{i=1}^k e_I^d(t_i) + q_I^d [e, e_r, t_m], \quad \psi_d(t_k) = \Delta_o^d e_I^d(t_{k-1})$$

$$= h_d[\chi(t_{k-1})] - y_d(t_k) \quad (3,15.b)$$

$$\dot{e}_{II} = \omega(e_{II}, t) + q_{II}[e, e_r, t] \quad (3,15.c)$$

3.2.3 Funcionamiento del Estimador

El Estimador-PI escrito en forma más explícita es:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \dot{\chi}_1 \\ \dot{\chi}_2 \\ \dot{\chi}_3 \\ \dot{\chi}_4 \\ \dot{\chi}_5 \\ \dot{\chi}_6 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} f_1(\chi, \chi_u, \rho) \\ f_2(\chi, \chi_u, \rho) \\ f_3(\chi, \chi_u, \rho) \\ f_4(\chi, \chi_u, \rho) \\ f_5(\chi, \chi_u, \rho) \\ f_6(\chi, \chi_u, \rho) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ s_o^c k_1^{oc} (y_1 - \chi_2) \\ s_o^c k_2^{oc} (y_2 - \chi_3) \\ s_o^c k_3^{oc} (y_3 - \chi_4) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ (s_o^c)^2 k_1^{oc} \int_0^t (y_1 - \chi_2) d\tau \\ (s_o^c)^2 k_2^{oc} \int_0^t (y_2 - \chi_3) d\tau \\ (s_o^c)^2 k_3^{oc} \int_0^t (y_3 - \chi_4) d\tau \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sum_{k=1}^{\infty} \{k_1^{od} [y_1^c(t_k) - \chi_5(t_{k-1})]\} \delta^*(t - t_k) \\ \sum_{k=1}^{\infty} \{k_2^{od} [y_2^c(t_k) - \chi_6(t_{k-1})]\} \delta^*(t - t_k) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sum_{k=1}^{\infty} \{k_1^{ld} t_m \sum_{i=1}^k [y_1^c(t_i) - \chi_5(t_{i-1})]\} \delta^*(t - t_k) \\ \sum_{k=1}^{\infty} \{k_2^{ld} t_m \sum_{i=1}^k [y_2^c(t_i) - \chi_6(t_{i-1})]\} \delta^*(t - t_k) \end{bmatrix} \quad (3,16) \end{aligned}$$

De esta última ecuación se puede identificar a sus términos de la siguiente manera: el primero es la velocidad de cambio de los estados estimados, el segundo es el modelo del reactor, el tercero es el término de corrección proporcional continuo (CPC), el cuarto es el término de corrección integral continuo (CIC), el quinto es el término de corrección proporcional discreto (CPD) y el sexto es el término de corrección sumatorio discreto (CSD).

Se puede observar lo siguiente:

i) la velocidad de cambio del estado estimado χ_1 (I) sólo es dirigida continuamente por el término del modelo del reactor:

$$\dot{\chi}_1 = f_1(\chi, \rho)$$

ii) las velocidades de cambio de los estados estimados $\chi_c = [\chi_2, \chi_3, \chi_4]^T$ (m, V y T) son dirigidas continuamente por el modelo y accionadas continuamente por los términos de CPC y CIC:

$$\dot{\chi}_c = f_c(\chi, \chi_u, \rho) + \text{CPC} + \text{CIC}$$

iii) las velocidades de cambio de los estados estimados $\chi_d = [\chi_5, \chi_6]^T$ (μ_0 y μ_2) son dirigidas continuamente por el modelo y accionadas por los términos de CPD y CSD en cada tiempo de medición discreto (t_k):

$$\dot{\chi}_d = f_d(\chi, \rho) + \text{CPD} + \text{CSD}$$

Esto último se puede entender de la siguiente manera con la ayuda de la Figura 8. En el tiempo t_{k-1} se muestrea la mezcla reaccionante y se introduce en el cromatógrafo, mientras se analiza la muestra, en el tiempo de análisis del cromatógrafo ($t_{k-1} < t < t_k$), los términos de CPD y CSD se apagan (ya que $\delta^*(t-t_k)$ se anula) y solo la velocidad de cambio de los estados estimados χ_d solo es dirigida por el modelo,

$$\dot{\chi}_d = f_d(\chi, \rho), \quad t_{k-1} < t < t_k,$$

luego, cuando se llega al tiempo t_k , se tiene un valor estimado “previo” χ_d^- y en este instante el cromatógrafo termina de analizar la muestra, y al mismo tiempo se alimentan los valores medidos al estimador y se prenden los términos de CPD y CSD en forma de pulso y así corregir con los estados estimados a los estados reales del reactor:

$$\chi_d^+ = \chi_d^- + \text{CPD} + \text{CSD}, \quad t = t_k.$$

3.2.4 Corrección entre Intervalos para los Estados cuyas Mediciones son DR

Como se podrá observar más adelante en el desempeño del Estimador, entre intervalos ($t_{k-1} < t < t_k$) para los estados (χ_d) en los que sólo actúan los términos de corrección discretos (CPD y CSD) se produce un pequeño sesgo de estimación producido por los errores en los parámetros del modelo. Este sesgo se corrige al final del intervalo cuando se activan los términos de corrección discretos.

Si se observa la ecuación del error de estimación del reactor correspondiente a la parte observable discreta,

$$e_1^d(t_k) = (I - K_o^d)e_1^d(t_{k-1}) - K_1^d \sum_{i=1}^k e_1^d(t_i) + q_1^d[e, e_r, t_m], \quad \psi_d(t_k) = \Delta_o^d e_1^d(t_{k-1}) \quad (3.15.b)$$

en donde

$$\theta_d(z, r) = \int_{t_{k-1}}^{t_k} \{\varphi_d(x)\}_{\{x=\phi^{-1}(z,r)\}} d\tau, \quad \zeta = z + e, \quad \rho = r + e_r,$$

$$\psi_d(t_k) = h_d[\chi(t_{k-1})] - y_d(t_k), \quad q_1^d(e, e_r, t_m) = \{\theta_d(z + e, r + e_r) - \theta_d(z, r)\}_{\{z(t)\}},$$

el sesgo de estimación entre intervalos (q_1^d) es compensado principalmente por la acción sumatoria (3^{er} término). Por lo cual podemos suponer la siguiente aproximación:

$$q_1^d[e, e_r, t_m] \approx K_1^d \sum_{i=1}^k e_1^d(t_i) \quad (3.17)$$

Ahora, la Ec. (3,11.b) del estimador correspondiente a la parte observable discreta en el intervalo $(t_{k-1} < t < t_k)$ toma la forma (ya que se apagan los términos de CPD y CSD):

$$\zeta_1^d(t_k) = \zeta_1^d(t_{k-1}) + \theta_d(\zeta, \rho), \quad \dim \zeta_1^d = \kappa_d = 2 \quad (3,18)$$

Se propone corregir esta última ecuación de predicción de la siguiente manera:

$$\zeta_1^d(t_k) = \zeta_1^d(t_{k-1}) + \theta_d(\zeta, \rho) + \hat{q}_k \quad \dim \zeta_1^d = \kappa_d = 2 \quad (3,19)$$

en donde

$$\hat{q}_k = q_1^d$$

Si suponemos constante a q_1^d , se obtiene el siguiente estimador para la parte discreta en el intervalo $(t_{k-1} < t < t_k)$:

$$\dot{\chi}_d = f_d(\chi, \rho) + (1/t_m) \hat{q}_{k-1} \quad (3,20)$$

en donde

$$\hat{q}_{k-1} = K_1^d \sum_{i=1}^{k-1} e_1^d(t_i).$$

Al tercer término se le llama de corrección por velocidad en los intervalos (CVI) y se puede notar que es constante y es conocido por la historia de mediciones anteriores.

3.3 Sintonización del Estimador

Lo que sigue ahora es el de determinar las matrices de ganancias adecuadas para que el estado del estimador converja al del reactor

3.3.1 Sintonización del Estimador-P

Las ganancias proporcionales $k_{i,j}^{u/oc}$ para la parte continua del estimador se obtienen en el Capítulo 2, en términos de frecuencias características de referencia (ω_j^{c0}) , y son:

$$k_1^u = \omega_u^r \quad (\text{entrada: } T_e) \quad (3,21.a)$$

$$k_j^{oc} = \omega_j^{rc}, \quad 1 \leq j \leq 3 \quad (\text{salidas: } m, V, T). \quad (3,21.b)$$

Análogamente al caso continuo (Capítulo 2), para que la dinámica de error discreta (3,10.c) sea casi-desacoplada se requiere que K_o^d sea de forma diagonal:

$$K_o^d = \text{bd}[k_1^{od}, k_2^{od}], \quad (3,22)$$

Para propósitos de diseño y sintonización, siguiendo la idea del diseño del caso continuo (Capítulo 2), consideremos la ecuación del error discreto (3,10.c) sin perturbaciones ($q_1^d = 0$), y tomemos su 1ª-diferencia del error de medición de salida discreta (3,10.c). Como resultado, obtenemos la siguiente dinámica de referencia de los errores de estimación de salidas DR que también es LNPA:

$$\psi_j^d(t_{k+1}) + (k_j^{od} - 1)\psi_j^d(t_k) = 0, \quad j = 1, 2 \quad (\text{salidas: } \mu_0, \mu_2) \quad (3,23)$$

Este sistema discreto de primer orden requiere, para que sea estable, que su polinomio característico,

$$\gamma_j + (k_j^{od} - 1) = 0 = (\gamma_j - z_j), \quad j = 1, 2 \quad (\text{salidas: } \mu_0, \mu_2) \quad (3,24)$$

tenga su único polo (valor propio) dentro del círculo unitario en el plano-z complejo para sistemas discretos (Kuo, 1992). Se puede ver en Kuo (1992) que la transformación,

$$s = (1/t_m)(\ln z) \quad (3,25)$$

nos da el polo 's' (Figura 9) de una ecuación diferencial ordinaria equivalente (recordar que t_m es el intervalo de tiempo de medición), es decir, que tiene la misma respuesta que la ecuación en diferencias (3,23),

$$\psi_j + \omega_j^d \psi_j = 0 \quad j = 1, 2 \quad (\text{salidas: } \mu_0, \mu_2) \quad (3,26)$$

la cual se puede parametrizar ($\omega_j^d = s_0^d \omega_j^{dr}$) y en ella se utiliza la estrategia de asignación de polos del Capítulo 2. El polo de esta ecuación diferencial de primer orden en término de la frecuencia característica es:

$$s_j = -\omega_j^d \quad j = 1, 2 \quad (\text{salidas: } \mu_0, \mu_2) \quad (3,27)$$

Ahora la inversa de la transformación de (3,25) es:

$$z = \exp(st_m) \quad (3,28)$$

La cual nos da el polo z_j correspondiente en el plano-z complejo, dentro del círculo unitario. Entonces, por comparación de los coeficientes de las dos ecuaciones (3,24), se obtienen las siguientes ganancias discretas:

$$k_j^{od} = \exp(-\omega_j^d t_m) \quad j = 1, 2 \quad (\text{salidas: } \mu_0, \mu_2) \quad (3,29)$$

3.3.2 Sintonización del Estimador-PI

Para el Estimador-PI, las ganancias k_j^{oc} y k_j^{lc} que se obtienen, según la estrategia de asignación de polos del Capítulo 2, en términos de frecuencias características de referencia (ω_j^{rc}) y de factores de amortiguamiento (ξ_j^c) de los polos de las dinámicas de referencia (Ec. 2,14) son:

$$k_j^{oc} = 2\xi_j^c \omega_j^c, \quad k_j^{lc} = \omega_j^{c^2}, \quad 1 \leq j \leq 3 \quad (m, V \text{ y } T) \quad (3,30)$$

De igual forma que para K_o^d , se requiere que K_1^d sea de forma diagonal

$$K_1^d = bd[k_1^{ld}, k_2^{ld}], \quad (3,31)$$

para que la dinámica de error discreta (3,15.b) sea casi-desacoplada.

Siguiendo el mismo procedimiento de la sintonización del Estimador-PI, se considera la ecuación del error discreto (3,15.c) sin perturbaciones ($q_1^d = 0$), y se toma la 2ª-diferencia del error de medición de salida discreta (3,15.b). Como resultado, obtenemos la siguiente dinámica de referencia de los errores de salidas DR que también es LNPA:

$$\psi_j^d(t_{k+2}) + (k_j^{od} + k_j^{ld} t_m - 2)\psi_j^d(t_{k+1}) + (k_j^{od} - 1)\psi_j^d(t_k) = 0, \quad 1 \leq j \leq 2 \text{ (salidas: } \mu_0, \mu_2) \quad (3,32)$$

Para que esta dinámica sea estable, requerimos que su polinomio característico,

$$\gamma_j^2 + (k_j^{od} + k_j^{ld} t_m - 2)\gamma_j + (k_j^{od} - 1) = 0 = (\gamma_j - z_1^j)(\gamma_j - z_2^j), \quad 1 \leq j \leq 2 \text{ (salidas: } \mu_0, \mu_2) \quad (3,33)$$

tenga sus dos polos z_1, z_2 dentro del círculo unitario en el plano-z (discreto). La transformación (3,25) nos da los polos s_i de una ecuación diferencial ordinaria equivalente a (3,32):

$$\Psi_j + 2\xi_j^d \omega_j^d \Psi + \omega_j^{d^2} \Psi = 0 \quad 1 \leq j \leq 2 \text{ (salidas: } \mu_0, \mu_2) \quad (3,34)$$

la cual se puede parametrizar ($\omega_j^d = s_o^d \omega_j^{dr}$) y en ella se utiliza la estrategia de asignación de polos del caso continuo (Capítulo 2), obteniendo los siguientes polos:

$$s_{j,i} = -\omega_j^d (\xi_j^d \pm \sqrt{\xi_j^{d^2} - 1}), \quad i = 1, 2 \text{ (polos), } j = 1, 2 \text{ (salidas: } \mu_0, \mu_2) \quad (3,35)$$

Ya habiendo escogido los polos s_i en términos de la frecuencia característica (ω_j^d) y del factor de amortiguamiento (ξ_j^d) del sistema diferencial equivalente (3,16), ahora la inversa de la transformación anterior (3,28) nos da los polos o valores característicos $z_i^j(\omega_j^d, \xi_j^d)$ correspondientes en el plano-z. Por comparación de los coeficientes de las dos ecuaciones (3,33), se obtienen las siguientes ganancias discretas:

$$k_j^{od} = 1 - \exp(-2\omega_j^d t_m \xi_j^d), \quad \omega_j^d = s_o^d \omega_j^{dr} \quad (3,36.a)$$

$$k_j^{ld} = (1/t_m) \{1 + \exp(-2\omega_j^d t_m \xi_j^d) - \exp(-\omega_j^d t_m \xi_j^d) [\exp(\omega_j^d t_m \sqrt{\xi_j^{d2} - 1}) + \exp(-\omega_j^d t_m \sqrt{\xi_j^{d2} - 1})]\} \quad (3,36.b)$$

3.3.3 Criterio de Deadbeat

Este criterio dicta la localización de los polos de los polinomios característicos de las dinámicas de referencia (Ec. 3,24 para el Estimador-P, Ec. 3,25 para el Estimador-PI) en el centro del círculo unitario en el plano-z complejo (Kwakernak y Sivan, 1972; Kuo, 1992).

Este es un criterio de sintonización para tratar de hacer converger al estimador en un mínimo número de etapas (igual al orden del sistema). Sin embargo hay que tomar en cuenta que la dinámica del error de estimación está sujeta a errores de modelado y/o perturbaciones (q_1^d).

Así pues, para el Estimador-P sus ganancias son:

$$k_j^{od} = 1, \quad j = 1, 2 \quad (\text{salidas: } \mu_0, \mu_2) \quad (3,37)$$

y para el Estimador-PI, las ganancias son:

$$k_j^{od} = 1, \quad k_j^{ld} t_m = 1, \quad j = 1, 2 \quad (\text{salidas: } \mu_0, \mu_2) \quad (3,38)$$

Con este criterio de sintonización se obtienen los valores máximos o más altos de las ganancias posibles a utilizar en el estimador.

3.4 Desempeño del Estimador

Las condiciones iniciales y de operación del reactor son descritas en el Capítulo 1.

Para probar el desempeño del estimador, las ganancias para la parte continua se escogen de acuerdo a los tiempos de asentamiento de referencia que se utilizaron para el estimador continuo del Capítulo 2, además de utilizar los mismos factores de amortiguamiento y parámetros de ajuste:

$$\{\tau_1^r, \tau_2^r, \tau_3^r; s_u \tau_u^r\} = \{125, 50, 75; 3\}, \quad \xi_{1/2/3} = 0.71, \quad s_o^c = 10, \quad s_u = 1.$$

También las condiciones iniciales del estimador son las mismas que se utilizan en el Capítulo 2:

$$[x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6]^T = [0.001 \text{ gmol/lit}, 0.575, 350 \text{ °K}, 1560 \text{ lit}, 0.00085 \text{ gmol/lit}, 65000 \text{ gmol/lit}]^T.$$

Se suponen intervalos de tiempo de medición (t_m) de 15 min. En la bibliografía se reportan tiempos que van desde 5 min. hasta 35 min. y entonces el tiempo que aquí se toma es un promedio de ellos.

NOTA: En las Figuras donde se muestra el desempeño del estimador, las trayectorias marcadas con (*) son las del reactor y las marcadas con (o) corresponden a las del estimador.

3.4.1 Estimación Nominal

Suponiendo que el estimador cuenta con un modelo perfecto se implementa el Estimador-P. En la Figura 10 se muestra su desempeño (con $\omega_1^d = 0.10$ y $\omega_2^d = 0.02$), en donde se puede observar lo siguiente: (i) una rápida convergencia para todos los estados del reactor y por consecuencia las variables de calidad de producto (Mn y Q) (ii) los tiempos de asentamiento de convergencia de las variables I, m, V y T son los mismo que en el caso continuo del Capítulo 1 (Fig. 4) y para los estados que corresponden a la parte observable discreta ($\mu_0 \approx 45$ min y $\mu_2 \approx 30$ min) sus tiempos de convergencia son mucho más rápidos que en el caso continuo del Capítulo 1 (Fig. 4) y (iii) μ_0 converge en dos etapas más a lo que es el mínimo número de etapas (= 1) y μ_0 lo hace en sólo una más. Con el criterio de sintonización de Deadbeat se obtiene un desempeño similar al que se muestra.

3.4.2 Estimación con Errores Paramétricos

Para ver la capacidad de tolerar errores del estimador propuesto, éste se implementa con los siguientes errores paramétricos en su modelo: el parámetro E_p/R (E_p es la energía de activación del paso de propagación) es de 2250 en vez de 2080 cal, a_h (constante adimensional de proporcionalidad de la función de intercambio de calor) es de 0.67 en vez de 0.74 y, f_1 (factor de eficiencia de generación de radicales libres en la etapa de descomposición del iniciador). Estos errores paramétricos significan un 16% de subestimación del calor de reacción liberado en el paso de propagación, un 10% de subestimación de la capacidad de eliminación de calor y un 5% de subestimación de la eficiencia del iniciador.

En la Figura 11 se muestra el desempeño del Estimador-P con criterio de sintonización Deadbeat. En la Figura se puede observar lo siguiente: (i) se obtiene un sesgo en la convergencia del estimador para todos los estados, (ii) igual desempeño para las variables I, m, V y T que en el mismo caso del Capítulo 1 (Fig. 5) (ii) siguiendo comparando con la estimación del Capítulo 1, aquí hay una reducción significativa del sesgo para los estados que corresponden a la parte observable discreta (μ_0 y μ_2) al igual que para Mn y Q.

Luego, se implementa el Estimador-PI pero sin su término de CSD (3,16). Sintonización con criterio Deadbeat. En la Fig. 12 se muestra su desempeño. Se puede notar la reducción del sesgo para los estados I, m V y T, observándose un igual desempeño que en el mismo caso de estimación del Capítulo 1 (Fig. 6). Sin embargo la acción integral en la parte observable continua no tienen ningún efecto en la inferencia de los momentos y el sesgo que se observa en la Fig. 11 se conserva.

De esto último, como siguiente paso natural es el de también incluir el término de CSD en el Estimador-PI.

Cabe mencionar que los estados I, m, V y T no dependen de los momentos de la DPM ($I, 1$) y que el término de CSD no tiene ningún efecto sobre la parte observable continua, por lo cual ya se tiene para I, m, V y T la mejor estimación (Fig 12).

NOTA: Atendiendo a lo último, en las siguientes figuras solo se muestra el desempeño en la estimación de los momentos de la DPM y de las variables de calidad (Mn y Q)

Para empezar se implementa el Estimador-PI con criterio de sintonización Deadbeat (Fig 13). Se obtiene convergencia asintótica sin sesgo pero lenta ($\mu_0 \approx 105$ min o 7 etapas, $\mu_2 \approx 165$ o 11 etapas). Además se observa una alta oscilación en las trayectorias estimadas al inicio, siendo más alta en μ_2 que en μ_0 . La naturaleza de alta ganancia de este criterio, con los errores inherentes de modelado y de la no-linealidad del estimador hacen suponer que la alta ganancia se “desperdicia”.

Ya que la alta ganancia resulta excesiva, se utilizan ganancias más bajas, las cuales se escogen según la estrategia dada en la Sección 3.3.2 de este capítulo.

En esta nueva etapa se implementa el estimador sintonizando las ganancias con el factor de amortiguamiento que se recomienda en las ganancias continuas ($\xi_j^d = 0.71$). En la Figura 14 se muestra su desempeño (con $\omega_1^d = 0.10$ y $\omega_2^d = 0.10$). Todavía se observa oscilación en las trayectorias del estimador al inicio aunque en menor medida que en el anterior (Fig. 13). Se mejora la velocidad de convergencia para μ_0 (≈ 60 min o 4 etapas) y para Mn es igual, y mejora poco para μ_2 (o Q) (≈ 135 o 9 etapas)

Debido a que el estimador cuenta con información más pobre por la naturaleza DR de las mediciones que accionan los términos de corrección discreta, el error de las dinámicas de referencia de estimación de salidas es más grande y sensible a oscilaciones inducidas por el factor de amortiguamiento ($\xi_j^d = 0.71$).

Debido a esto, se incrementa el valor de ξ_j^d , encontrando que se obtiene una mejor convergencia con valor desde valores mayores que 1, como se muestra en la Figura 15, para un valor de $\xi_j^d = 1$ con $\omega_1^d = 0.03$ y $\omega_2^d = 0.03$. En ella se observa que no hay oscilación al inicio en las trayectorias estimadas, obteniéndose una buena convergencia para μ_0 (≈ 60 min o 4 etapas) y debido a la anulación de la oscilación mejora el estimado de Mn (≈ 45 min o 3 etapas). También se observa una mejora en el estimado de μ_0 y de Q (≈ 105 min o 7 etapas).

Como se puede observar en la Figuras anteriores, se obtiene un pequeño sesgo sistemático entre los intervalos de medición. Para tratar de anularlos se implementa entre los intervalos, como se explica en la Sección 3.2.3 de este capítulo, el término de corrección por velocidad en los intervalos (CVI).

En la Figura 16 se muestra el desempeño del Estimador-PI más el término entre intervalos de CVI para un valor de $\xi_j^d = 0.71$ con $\omega_1^d = 0.06$ y $\omega_2^d = 0.06$. Como se puede esperar, las oscilaciones inducidas por ξ_j^d , al inicio en las trayectorias estimadas, no ayudan a una rápida convergencia. Los estimados convergen asintóticamente y para la estimación de μ_0 (y de Mn) se observa una anulación de los sesgos entre intervalos y para μ_2 (y Q) los sesgos no se anulan pero se reducen significativamente.

Entonces, al aumentar el valor de los factores de amortiguamiento se obtienen mejores desempeños en valores entre 1 y 5. Finalmente, en la Figura 17 se muestra el desempeño del Estimador-PI+CVI para un valor de $\xi_j^d = 3.0$ con $\omega_1^d = 0.018$ y $\omega_2^d = 0.0285$. Se puede observar que no hay oscilaciones en las trayectorias estimadas. Se obtiene una rápida convergencia de $\mu_0 \approx 60$ min o 4 etapas) y de Mn (≈ 45 min o 3 etapas) y se anulan los sesgos entre intervalos por lo cual, se obtiene un estimado adecuadamente continuo de μ_0 y de Mn. Se obtiene una convergencia más lenta para μ_2 y Q (≈ 105 min o 7 etapas) y, aunque no se eliminan totalmente los sesgos entre intervalos estos se reducen significativamente.

3.5 Figuras

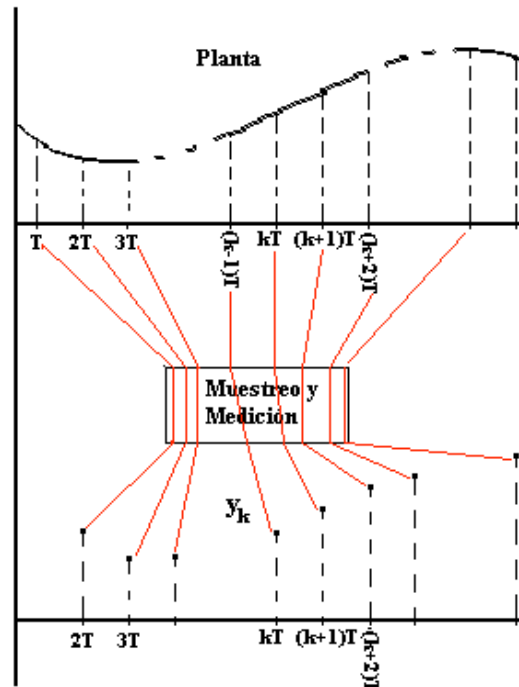


Figura 7. Muestreo y Medición de Variables de Naturaleza DR.

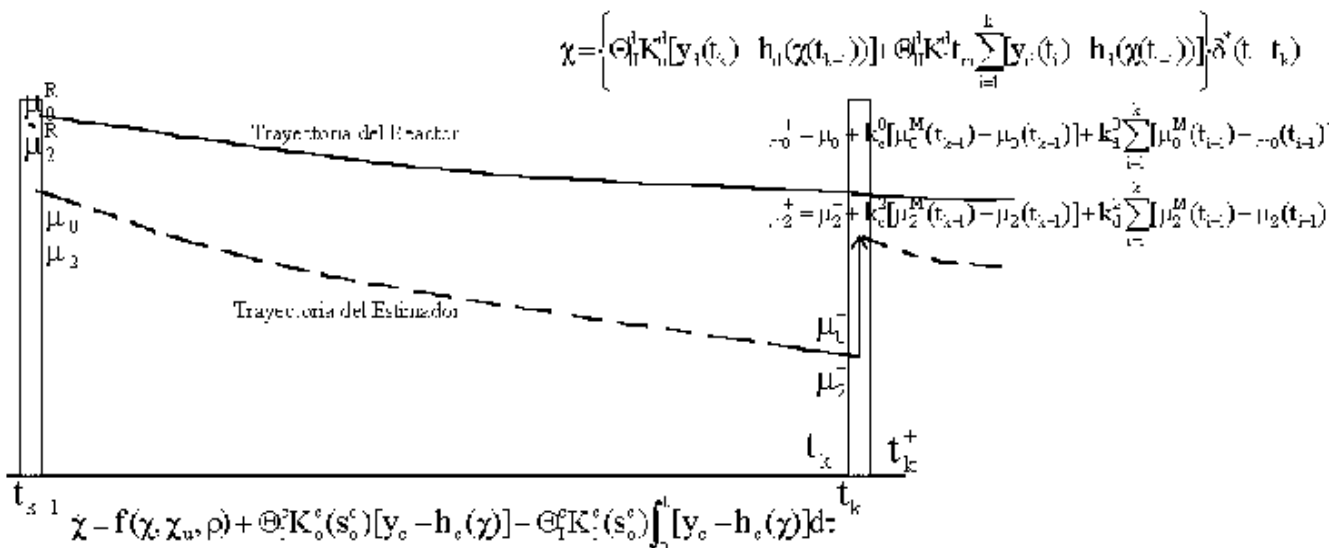


Figura 8. Funcionamiento del Estimador Discreto-Retardado.

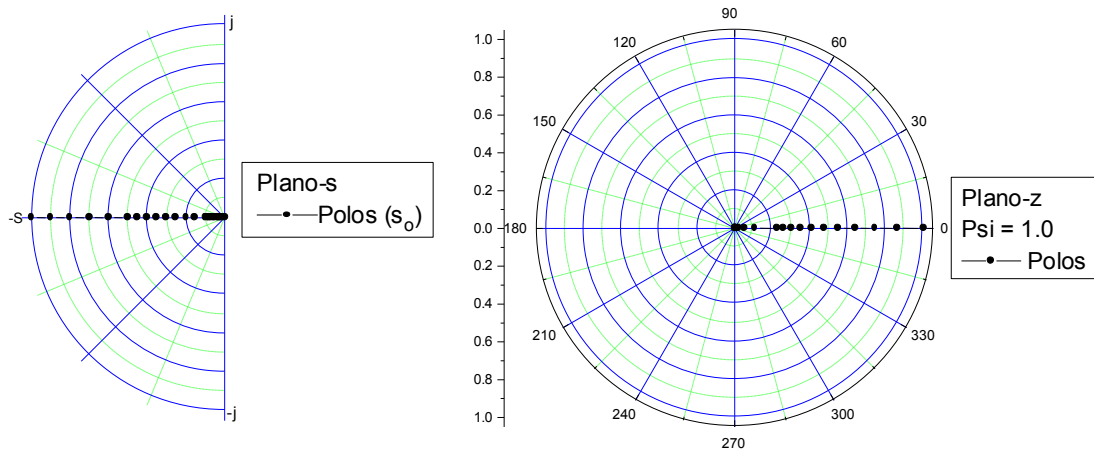


Figura 9.a. Transformación del Plano-s Complejo al Plano-z Complejo y viceversa Dinámica de 1^{er} Orden

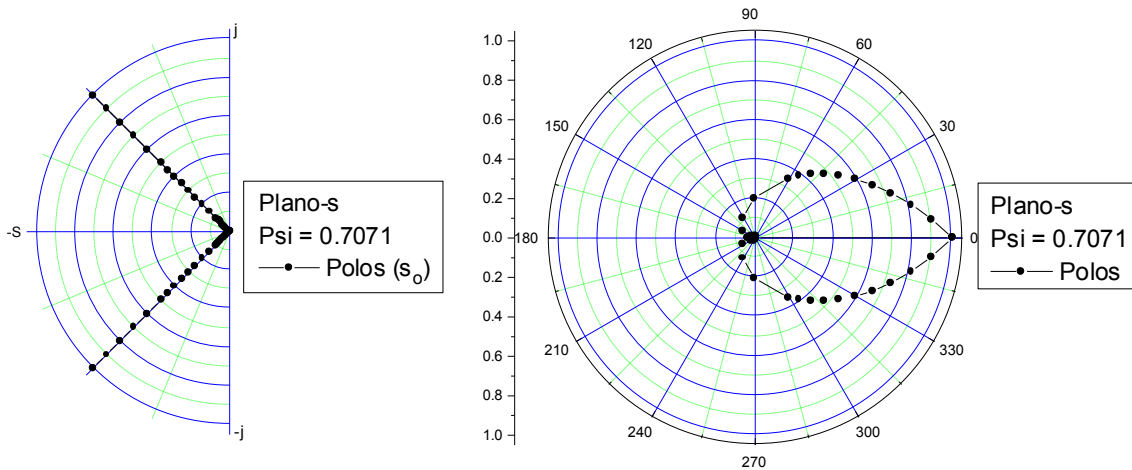


Figura 9.b. Transformación del Plano-s Complejo al Plano-z Complejo y viceversa Dinámica de 2^o Orden

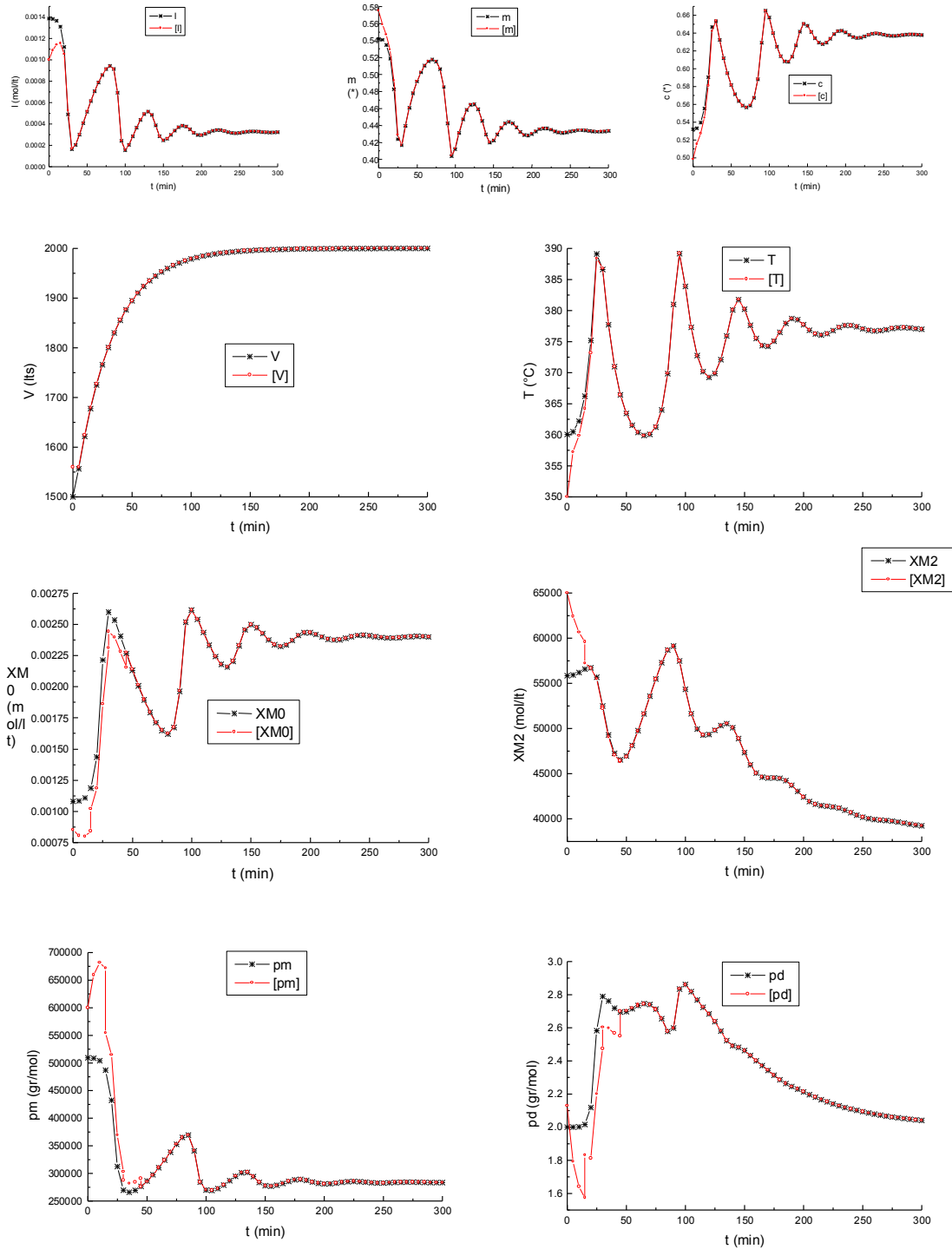


Figura 10. Desempeño del Estimador-P con Modelo Perfecto
 $s_0 = 10$, $\omega_0 = 0.10$, $\omega_0 = 0.02$

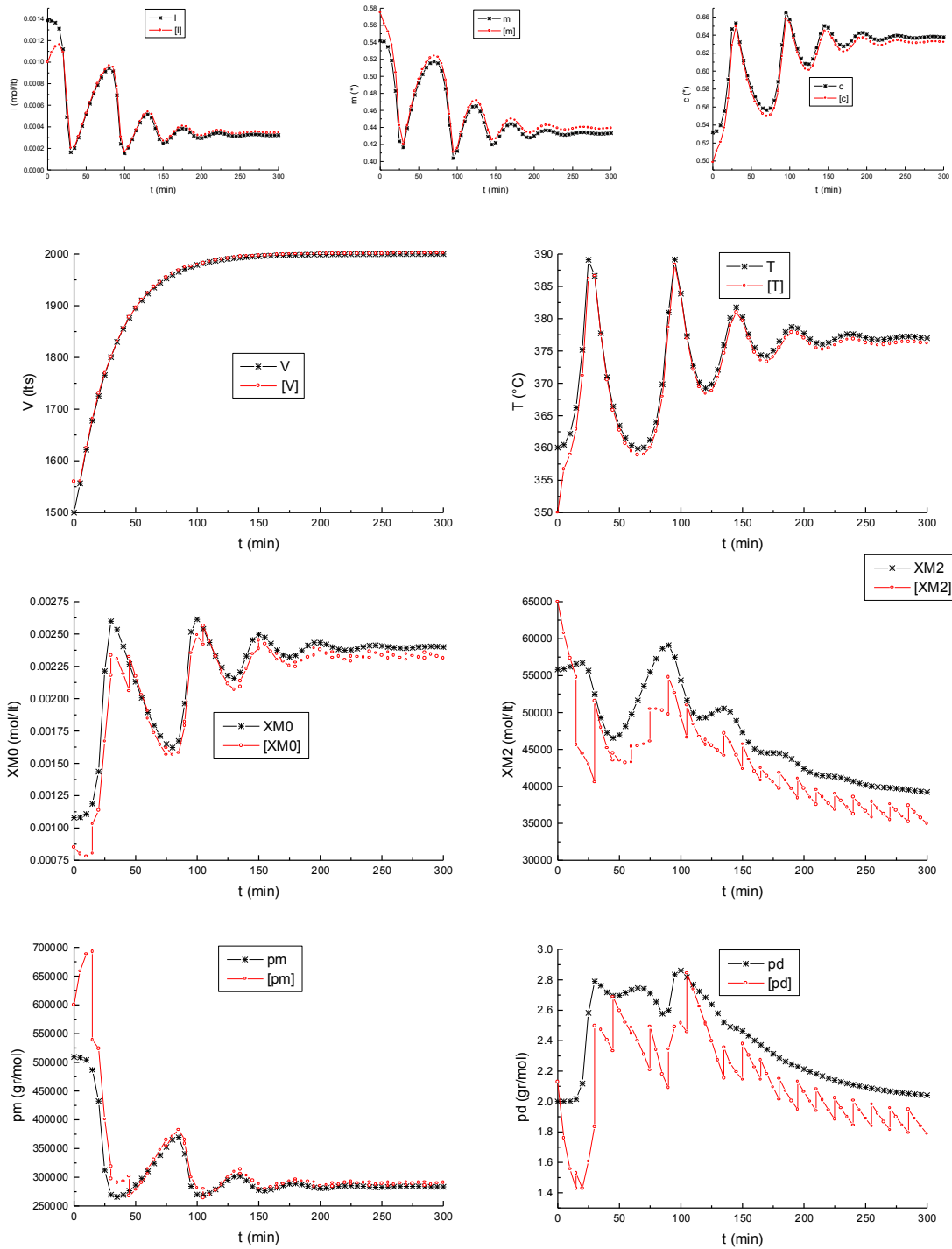


Figura 11. Desempeño del Estimador-P con Modelo con Errores Paramétricos $s_0 = 10$, Deadbeat

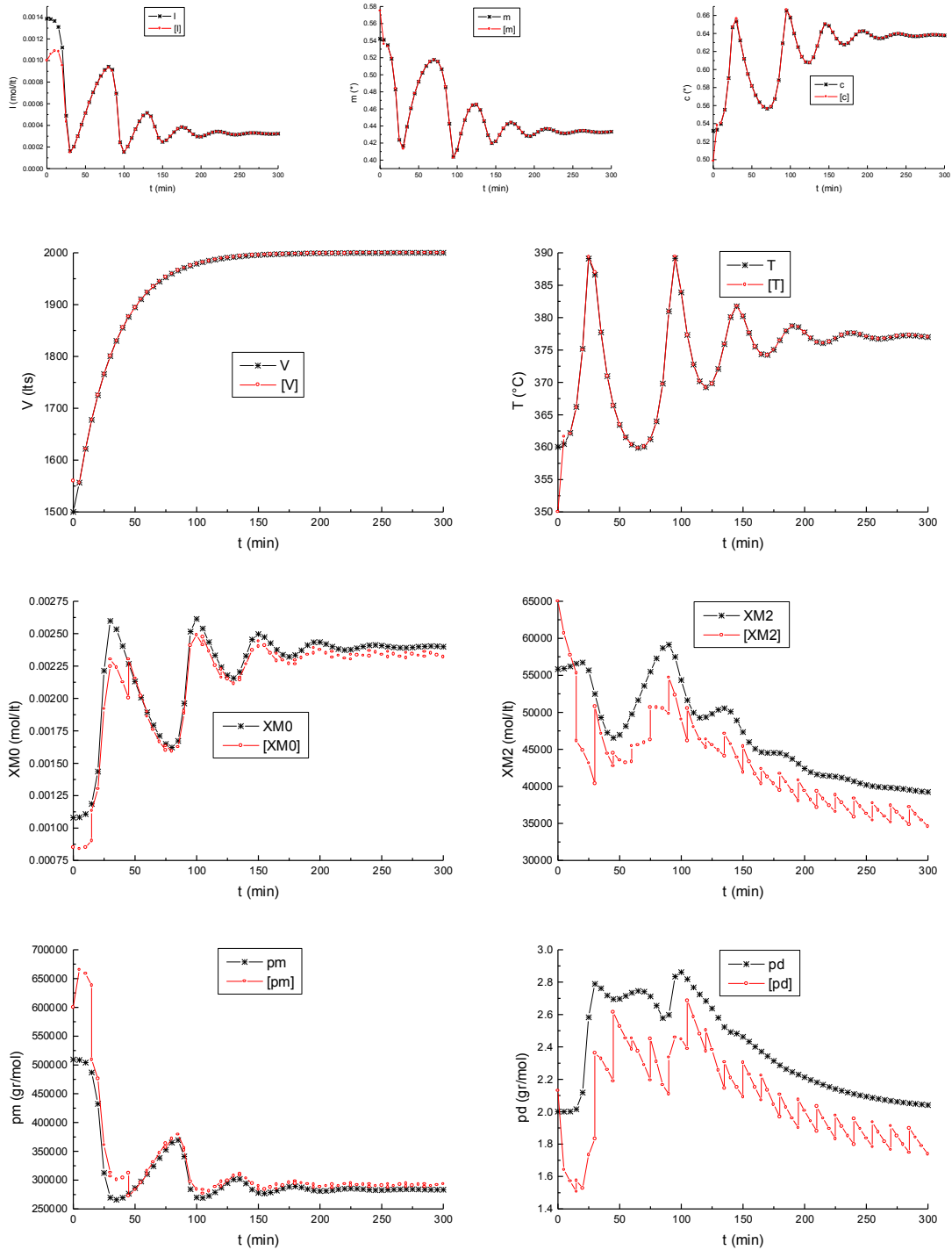


Figura 12. Desempeño del Estimador-PI con Modelo con Errores Paramétricos y sin TCSD $s_0 = 10$, Deadbeat

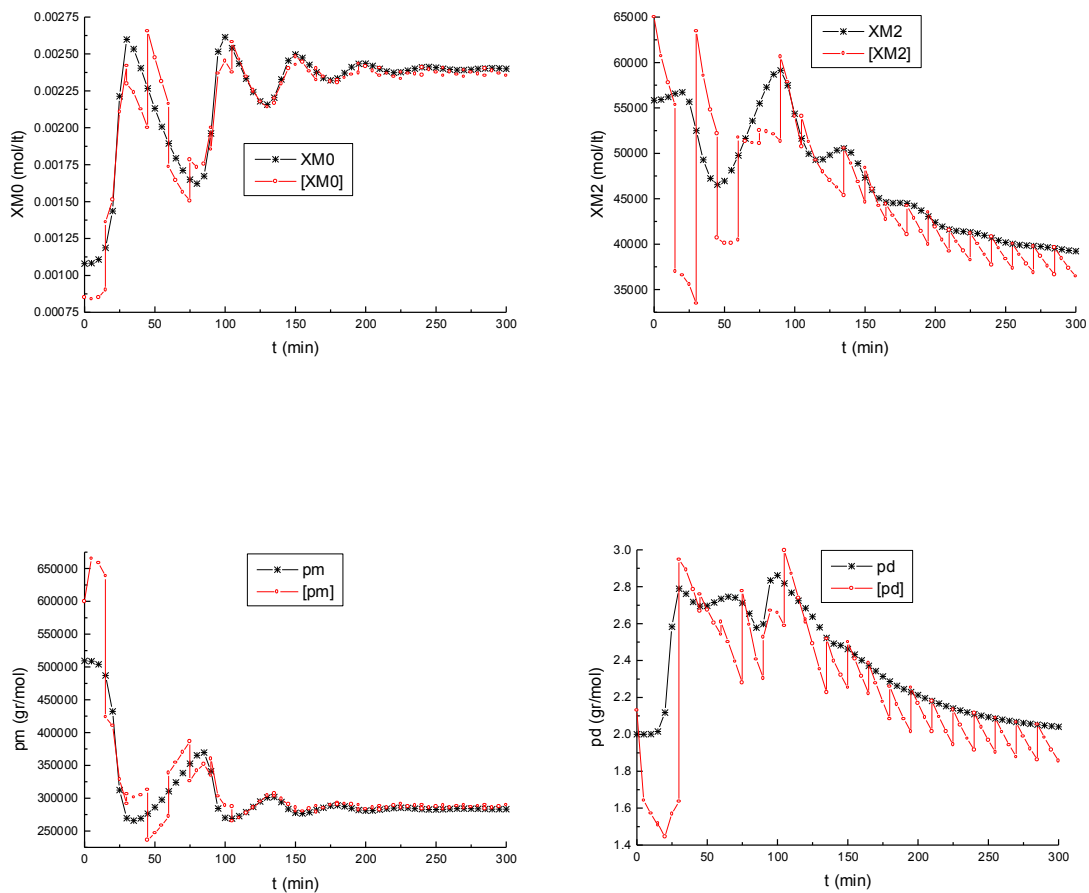


Figura 13. Desempeño del Estimador-PI con Modelo con Errores Paramétricos $s_0 = 10$, Deadbeat

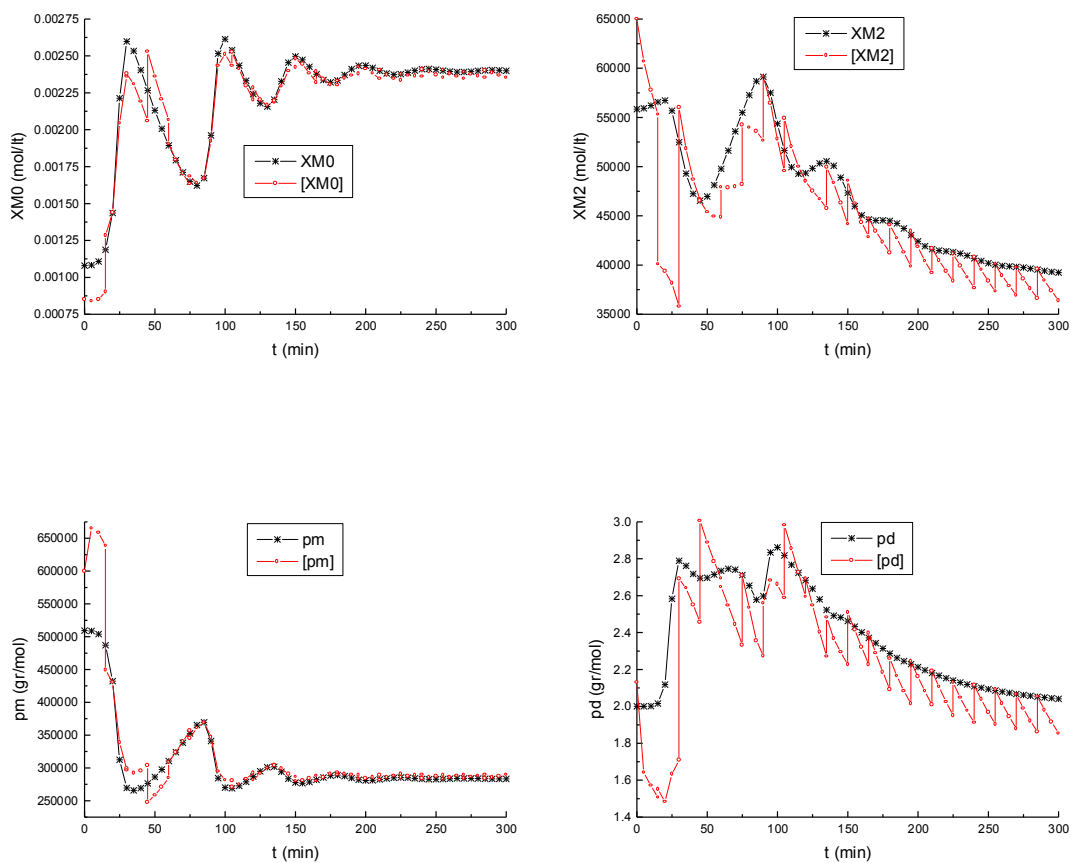


Figura 14. Desempeño del Estimador-PI con Modelo con Errores Paramétricos
 $s_0 = 10, \xi = 0.7071, \omega_0 = 0.10, \omega_0 = 0.10$

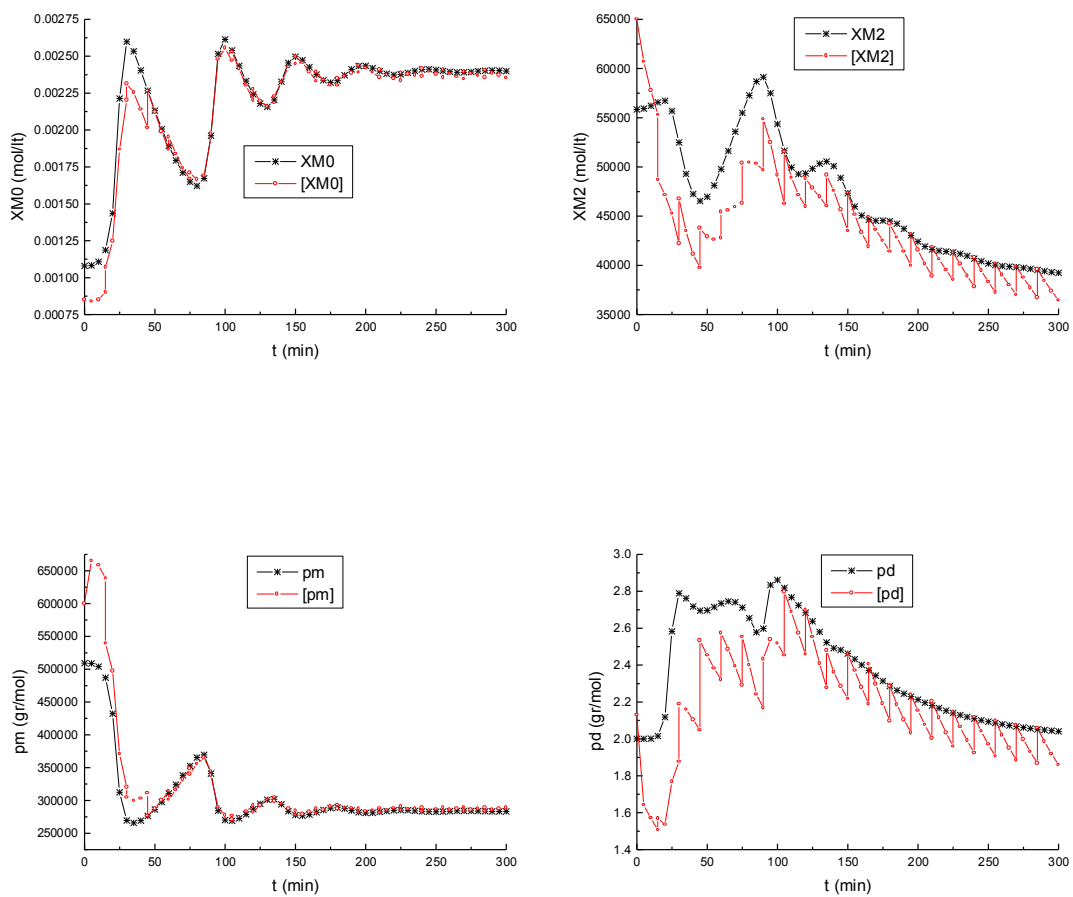


Figura 15. Desempeño del Estimador-PI con Modelo con Errores Paramétricos
 $s_0 = 10$, $\xi = 1.0$, $\omega_0 = 0.03$, $\omega_0 = 0.03$

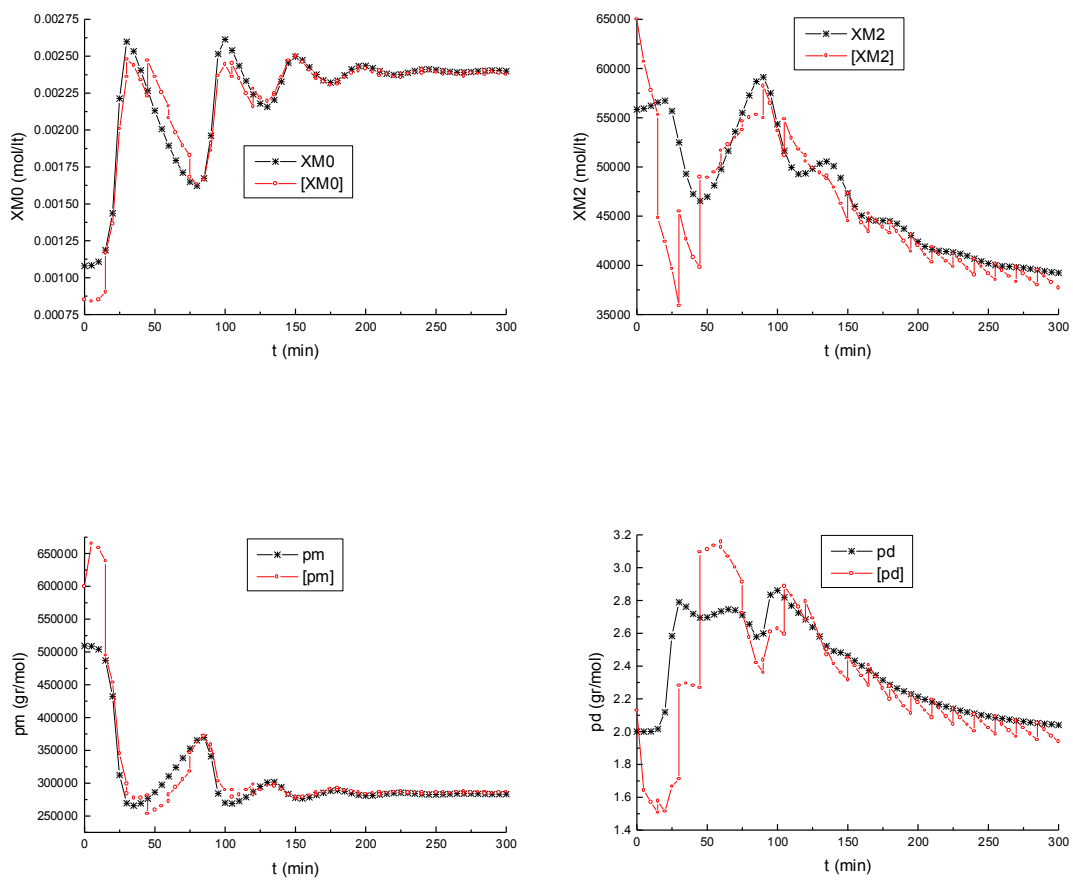


Figura 16. Desempeño del Estimador-PI+CVI con Modelo con Errores Paramétricos
 $s_0 = 10$, $\xi = 0.7071$, $\omega_0 = 0.06$, $\omega_0 = 0.06$

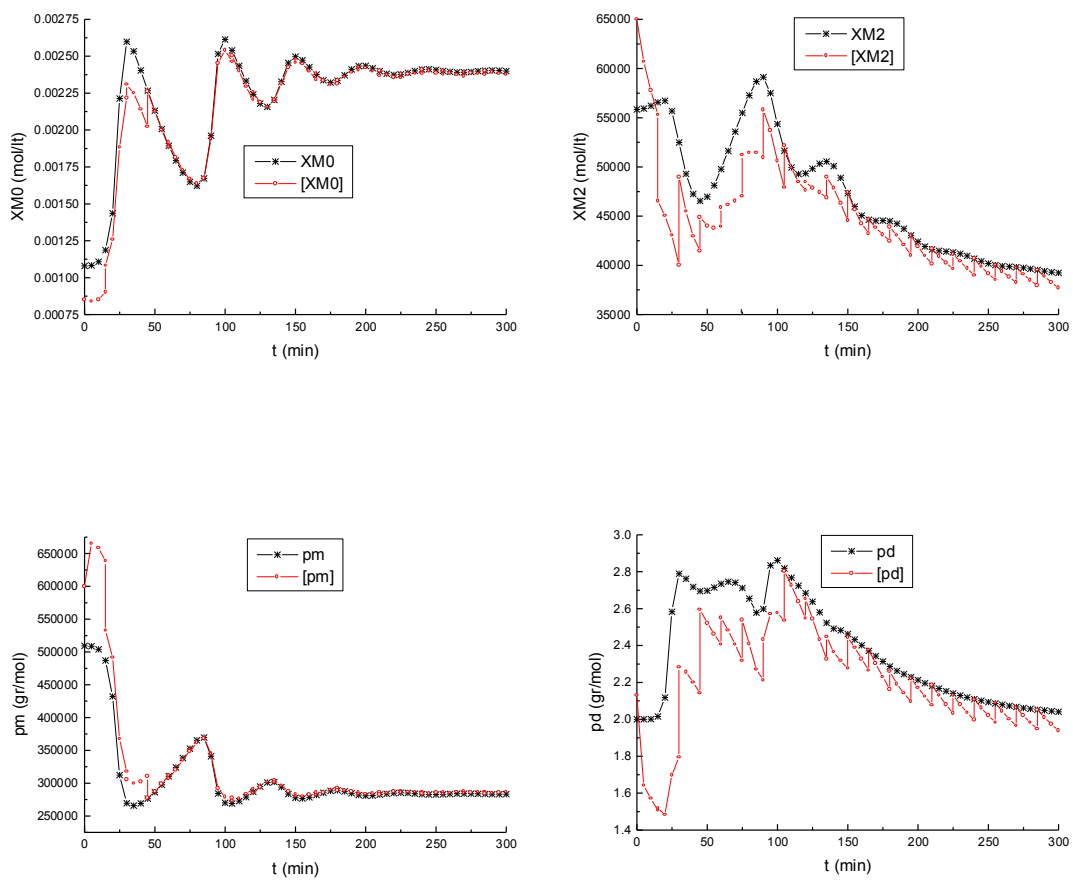


Figura 17. Desempeño del Estimador-PI +CVI con Modelo con Errores Paramétricos
 $s_0 = 10$, $\xi = 3.0$, $\omega_0 = 0.018$, $\omega_0 = 0.0285$

NOTA: En las gráficas anteriores $XM0$ se refiere a μ_0 y $XM2$ se refiere a μ_2 .

CONCLUSIONES

Se construye un estimador de estados tipo geométrico para un reactor de homopolimerización en masa vía radicales libres.

El estimador de estados es alimentado de mediciones continuas-instantáneas de concentración, volumen y temperatura, y de mediciones discretas-retardadas de los momentos de la distribución de pesos moleculares del producto polimérico. El estimador muestra un buen desempeño en la estimación de todos los estados del reactor a pesar de los errores en los parámetros de su modelo. Cabe recalcar que en las variables de mayor interés, las que determinan la calidad del producto, se obtiene una rápida estimación continua-instantánea del peso molecular promedio del producto polimérico y con lo que respecta a su polidispersidad, se obtiene una estimación continua-instantánea un poco más lenta con pequeños sesgos entre intervalos de medición.

El estimador se basa en una definición tipo geométrico de estimabilidad no lineal a la cual se asocia un cambio de coordenadas que lleva al modelo no lineal del reactor a una forma casi-lineal. El Estimador consta de una parte continua y una parte discreta. De los resultados numéricos se puede pensar que la parte discreta hereda la propiedad de convergencia del estimador totalmente continuo que ya se ha estudiado.

Se obtiene un procedimiento sistemático de sintonización del estimador. De la forma casi-lineal del estimador, al igual que para el estimador continuo, para la parte discreta se obtienen dinámicas de referencia (casi-lineales, no interactivas y de polo asignable) cuyos coeficientes son dados por las ganancias. De esta forma el sintonizado y la interpretación del desempeño del estimador en función de las ganancias se hace utilizando técnicas de control convencional para sistemas lineales.

RECOMENDACIONES PARA TRABAJO FUTURO

Se debe validar el funcionamiento del estimador con datos experimentales. En la realidad la polimerización en masa no es práctica, sino que se lleva a cabo en solución. Por lo cual se debe extender el esquema de estimación para el caso en solución y comprobar su funcionamiento con datos experimentales reales. Se puede ver los resultados a nivel simulación que se obtienen aquí como un buen indicador de que el estimador es lo suficientemente robusto para se pueda funcionar en situaciones reales.

Aunque se obtiene un buen desempeño del estimador, este trabajo puede ser el primer paso de un estudio más profundo de estimadores para reactores de polimerización por radicales libres donde se considere:

- i) Condición de resolubilidad y su interpretación física.
- ii) Criterios y condiciones para convergencia y estabilidad robusta.
- iii) Procedimiento sistemático de sintonización.
- iv) Función con ruido en las mediciones.

Ya que la importancia del monitoreo estriba en determinar las actividades futuras en la operación del reactor, entre ellas el control. Finalmente, partiendo de los resultados del punto anterior insertar el esquema de estimación en una estrategia de control adecuada. Se piensa en una estrategia de control geométrico por retroalimentación de salidas atendiendo a las mismas consideraciones del diseño del estimador.

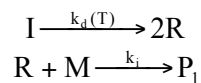
De ser posible, extender el diseño a una clase más general de procesos no lineales.

APENDICE I

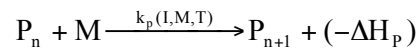
MODELO DEL REACTOR DE HOMOPOLIMERIZACIÓN VIA RADICALES LIBRES TIPO TANQUE AGITADO (LOTE, SEMILOTE, CONTINUO) - FUNCIONALIDADES Y PARAMETROS -

MECANISMO CINETICO

- Iniciación

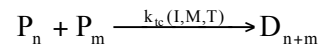


- Propagación

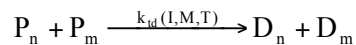


- Terminación

- Combinación



- Desproporción



VELOCIDADES DE REACCION DE LAS ESPECIES

- Iniciador

$$r_I = -k_d I$$

- Monómero

$$r_M = -2fk_d I - k_p M \lambda_0$$

- Polímero Desactivado

$$r_{D_n} = k_{tc} \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{n-1} P_m P_{n-m} + k_{td} \lambda_0$$

BALANCES DE MATERIA

- Iniciador

$$\frac{d(VI)}{dt} = Vr_I + q_c I_c - qI$$

$$\frac{d(I)}{dt} = -r_I + \varepsilon r_{pol} + \frac{W_I - q_e I}{V}$$

- Monómero

$$\frac{d(VM)}{dt} = Vr_M + q_e M_e - qM$$

$$\frac{d(m)}{dt} = -r_{pol} + \varepsilon m r_{pol} + (m_e - m)Pe$$

- Masa Total y/o Volumen

$$\frac{d(V\rho)}{dt} = q_e \rho_e - q\rho$$

$$\frac{d(V)}{dt} = -\varepsilon r_{pol} V + q_e - q$$

- Polímero Inactivo

$$\frac{d(VD_n)}{dt} = Vr_{D_n} + q_e D_{n_e} - qD_n$$

$$\frac{d(D_1)}{dt} = \varepsilon r_{pol} D_1 + k_{td} \lambda_0 P_1 + (D_{1_e} - D_1)Pe$$

$$\frac{d(D_n)}{dt} = \varepsilon r_{pol} D_n + k_{tc} \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{n-1} P_m P_{n-m} + k_{td} \lambda_0 P_n + (D_{1_e} - D_1)Pe$$

En donde:

$$r_{pol} = \frac{r_M}{M^0} = 2fk_d \frac{I}{M^0} + k_p m \lambda_0, \quad Pe = \frac{q_e}{V}, \quad m = \frac{M}{M^0}$$

MOMENTOS DE LAS DISTRIBUCIONES DE LONGITUD DE CADENA

- Polímero Activo: $\lambda_i = \sum_{n=1}^{\infty} n^i P_n$

$$\lambda_0 = \sqrt{\frac{2fk_d I}{k_T}}$$

$$\lambda_1 = \frac{2fk_d I + k_p M \lambda_0}{k_T \lambda_0}$$

- $\lambda_2 = \left(1 + \frac{2k_p M}{k_T \lambda_0}\right) \lambda_1$
- **Polímero Inactivo:** $\mu_i = \sum_{n=1}^{\infty} n^i D_n$
- $\frac{d(\mu_0)}{dt} = \varepsilon r_{pol} \mu_0 + \left(\frac{1}{2} k_{tc} + k_{td}\right) \lambda_0^2 + (\mu_{0e} - \mu_0) Pe$
- $\frac{d(\mu_1)}{dt} = \varepsilon r_{pol} \mu_1 + (k_{tc} + k_{td}) \lambda_0 \lambda_1 + (\mu_{1e} - \mu_1) Pe$
- $\frac{d(\mu_2)}{dt} = \varepsilon r_{pol} \mu_2 + (k_{tc} + k_{td}) \lambda_0 \lambda_2 + k_{tc} \lambda_1^2 + (\mu_{2e} - \mu_2) Pe$

BALANCE DE ENERGIA

$$\frac{dT}{dt} = \beta(m) r_{pol} - \gamma(m, V)(T - T_c) + \frac{1 - \varepsilon_M m_c}{1 - \varepsilon_M m} (T_c - T) Pe$$

En donde:

$$\beta(m) = \frac{(-\Delta H_p)}{\rho c_p} M^0, \quad \gamma(m, V) = \frac{Ah}{V \rho c_p}$$

VISCOSIDAD Y COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR

$$\mu = a_\mu T^{b_\mu} E^{c_\mu} (m, T)$$

$$\frac{hD}{k} = h_1 \left(\frac{L^2 N \rho}{\mu} \right)^{h_2} \left(\frac{c_p \mu}{k} \right)^{h_3} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{h_4}$$

VARIABLES IMPORTANTES

* Densidad

$$\rho = \frac{\rho_M^0}{1 - \varepsilon} (1 - \varepsilon m), \quad \rho_c = \frac{\rho_M^0}{1 - \varepsilon} (1 - \varepsilon m_c)$$

* Factor de Contracción

$$\varepsilon = 1 - \frac{\rho_M^0}{\rho_D^0},$$

* Concentraciones Adimensionales del Monómero y Polímero

$$m = \frac{M}{M^0} = \frac{\rho_M}{\rho_M^0}, \quad d = \frac{D}{D^0} = \frac{\rho_D}{\rho_D^0}, \quad m + d = 1$$

* Conversión, Fracción Masa de Sólidos y Fracción Volumen Libre de Sólidos

$$x = \frac{1 - m}{1 - \varepsilon_M m}, \quad \phi_m = \frac{1 - m}{1 - \varepsilon_M m}, \quad \phi_v = m$$

FUNCIONES CINÉTICAS

• Constantes Cinéticas

$$k_d = \exp\left(a_d - \frac{b_d}{T}\right) [=] \text{1/min}$$

$$k_p^0 = \exp\left(a_p - \frac{b_p}{T}\right) [=] \text{lt/mol-min}$$

$$k_T^0 = \exp\left(a_T - \frac{b_T}{T}\right) [=] \text{lt/mol-min}$$

• Efecto Gel

$$\frac{1}{k_p} = \frac{1}{k_p^0(T)} + \theta_p(T)E(m, T)\lambda_0$$

$$\frac{1}{k_T} = \frac{1}{k_T^0(T)} + \theta_T(I, T)E(m, T)\lambda_0$$

En donde:

$$\theta_p = \exp\left(a_{\theta_p} - \frac{b_{\theta_p}}{T}\right)$$

$$\theta_T = \exp\left(a_{\theta_T} - b_{\theta_T}I - \frac{d_{\theta_T}}{T}\right)$$

$$E = \exp\left(\frac{-2.3\phi_v}{A(T) + B(T)\phi_v}\right)$$

$$A(T) = a_A + b_A\left(1 - \frac{T}{T_g}\right) + c_A\left(1 - \frac{T}{T_g}\right)^2$$

$$B(T) = a_B + b_B\left(1 - \frac{T}{T_g}\right)$$

PARAMETROS DEL MODELO

* PROPIEDADES BASICAS

peso molecular del monómero (metilmetacrilato) (gr/mol)

$$PM_m = 100.12$$

peso molecular del iniciador (AIBN) (gr/mol)

$$PM_I = 164.21$$

densidad del polímero (gr/dm³)

$$\rho_p^\circ = 1200.$$

densidad del monómero (gr/dm³)

$$\rho_m^\circ = 891.6$$

entalpía de propagación (cal/mol)

$$\Delta H_r = 13782.$$

capacidad calorífica del mon+pol (cal/gr-°C)

$$c_p = 0.4$$

conductividad del mon+pol (cal/dm-min-°C)

$$k = 0.2768$$

* CONSTANTES DE REACCION

disociación

$$a_d = 38.685$$

$$b_d = 15430.29$$

$$f = 0.58$$

propagación sin gel

$$a_p = 17.1999$$

$$b_p = 2190.74$$

terminación sin gel

$$a_T = 22.4948$$

$$b_T = 352.793$$

parámetros para la función A(gel)

$$a_A = .1678$$

$$b_A = 0.$$

$$c_A = 1.23517$$

$$T_g = 387.15 \quad \text{glass transition temperature of PMMA (°K)}$$

parámetros para la función B(gel)

$a_B = .03$
 $b_B = 0.$
parámetros para θ_p
 $a_{,p} = 35.11094$
 $b_{,p} = 13964.$
parámetros para θ_T
 $a_{,T} = 47.03$
 $b_{,T} = 48.85$
 $c_{,T} = 637.19$
 $d_{,T} = 17956.$

* DIMENSIONES DEL REACTOR Y AGITACION

diámetro del reactor (dm)

$$D = 12.$$

diámetro del agitador (dm)

$$L = 6.$$

revoluciones por minuto de agitación

$$N = 440.$$

parámetros para viscosidad (gr/dm-min) del monómero
en función de temperatura (K)

$$a_v = 2.484 \times 10^{29}$$

$$b_v = 9.6973$$

parámetro para la viscosidad mon+pol en volumen libre

$$c_v = 1.99$$

parámetros para el coef. de transp. de calor

$$h_1 = 0.74$$

$$h_2 = 2./3.$$

$$h_3 = 1./3.$$

$$h_4 = 0.14$$

APENDICE II

ESTIMACION DINAMICA DE PLANTAS NO LINEALES

De: Alvarez J., "A Robust State Estimator Design for Nonlinear Plants", ACC, 5, (1997).

Se considera el siguiente sistema no lineal

$$\dot{x} = f[x, u(t), r], \quad y = h(x, r), \quad (x, u, r) \in S = X \times U \times R \quad (A1)$$

el cual representa nuestra planta con n estados (x), m mediciones de salida (y), p entradas conocidas (u) y, n_r parámetros (r). Los mapas (f) y (h) son "suaves" (infinitamente diferenciables) en el espacio S , el cual es compacto (limitado y cerrado) debido a consideraciones físicas y prácticas. De tal modo que, para cada condición inicial [$x(t_0) = x_0, x_0 \in X_0$] y para las trayectorias conocidas continuas de entrada $u(t)$ se determina una trayectoria única (posiblemente inestable) de la planta

$$x(t) = \theta_x[t, t_0, x_0, u(t)] \quad (A2)$$

la cual, a su vez, determina las trayectorias de salidas

$$y(t) = \theta_y[t, t_0, x_0, u(t), r] \quad (A3)$$

Ya que en situaciones prácticas sólo las mediciones de las salidas están disponibles, se tiene la necesidad de diseñar y/o construir un estimador de estados apropiado [construido con una aproximación (ρ) de (r)]:

$$\dot{\chi}_e = f_e[\chi_e, u(t), y(t), \rho], \quad \psi = h_e(\chi_e, \rho), \quad \chi_e(t_0) = \chi_{e0} = \chi(t_0) \quad (A4)$$

que accionado por las señales (mediciones) de entradas $u(t)$ y de salidas $y(t)$ genere una trayectoria $\chi(t)$ que converja de forma robusta y exponencial (RE) a la trayectoria de la planta $x(t)$.

La Propiedad de Estimabilidad.

Pero antes de diseñar el estimador debemos establecer si la planta es o no es estimable. Para lo cual se considera el siguiente problema auxiliar: además de asumir que las señales (mediciones de entradas y salidas) son funciones suaves del tiempo, construir un estimador cuando se permite y se tienen disponibles dichas señales y sus derivadas temporales.

Para seguir adelante es necesario introducir la definición de la derivada direccional $L_f \alpha$ del campo escalar $\alpha[x, u(t)]$ con respecto al campo vectorial $f[x, u(t)]$, y su fórmula de recursión:

$$L_f^{i+1}\alpha = L_f(L_f^i\alpha), \quad L_f\alpha = \left(\frac{\partial\alpha}{\partial x}\right)f + \left(\frac{\partial\alpha}{\partial u}\right)\dot{u}, \quad L_f^0\alpha = \alpha \quad (\text{A5})$$

Se puede notar que con el mapa (h) se puede definir una superficie de dimensión $(n-m)$ en el espacio euclidiano \mathbf{R}^n donde están contenidos los estados de la planta. Entonces, sea un conjunto de enteros $\kappa_1, \dots, \kappa_m$ (uno para cada salida) ($\kappa_1 + \dots + \kappa_m = \kappa \leq n$) que determinen los siguientes mapas:

$$\phi_I(x, x_u, r) = [h_1, \dots, L_f^{(\kappa_1-1)}h_1; \dots; h_m, \dots, L_f^{(\kappa_m-1)}h_m]^T \quad (\text{A6.a})$$

$$\varphi(x, x_u, v, r) = [L_f^{\kappa_1}h_1; \dots; L_f^{\kappa_m}h_m]^T \quad (\text{A6.b})$$

donde (x_u) se puede considerar como una entrada “aumentada”, generada por el mapa ϕ_I , que consiste de las entradas conocidas y de sus derivadas temporales:

$$x_u = [u_1, \dots, u_1^{(v_1-1)}; \dots; u_p, \dots, u_p^{(v_p-1)}]^T, \quad v_1 + \dots + v_p = v \geq p, \quad v_i > 0 \quad (\text{A7.a})$$

$$v = [u_1^{(v_1)}; \dots; u_p^{(v_p)}]^T \quad (\text{A7.b})$$

de tal forma que el mapa ϕ_I determina una superficie que cambia con el tiempo de dimensión $(n-\kappa)$, en cuya superficie se debe encontrar el estado de la planta:

$$E(t) = \{x \in X / \phi_I[x, x_u(t), r] = y\}^T, \quad \dim E(t) = n-\kappa \quad (\text{A8})$$

donde (y) se puede considerar como una salida “aumentada” obtenida de las salidas actuales y de sus derivadas temporales:

$$y = [y_1, \dots, y_1^{(\kappa_1-1)}; \dots; y_m, \dots, y_m^{(\kappa_m-1)}]^T \quad (\text{A9})$$

Si $\kappa = n$, de la (Ec. A8) y, si el mapa ϕ_I es invertible para x de forma robusta (Rx -invertible), se obtiene una solución:

$$\chi(t) = \phi_I^{-1}[y(t), x_u, r] \quad (\text{A10})$$

que determina de forma única una trayectoria de estado (estimada) que debe coincidir con el estado de la planta [$\chi(t) = x(t)$].

Pero si $\kappa < n$, entonces la superficie $E(t)$ se dice que es no observable ya que no puede determinarse en esta superficie de forma completa el estado de la planta. Y se tiene una dinámica no observable de dimensión $(n-\kappa)$:

$$\dot{x}^* = f[x, u(t), r], \quad x^*(0) = x_0 \quad (\text{A11})$$

y una trayectoria no observable $x^*(t) \in E(t)$.

Entonces el estimador auxiliar se construye con n ecuaciones independientes: κ ecuaciones algebraicas que definen la superficie no observable $E(t)$ y, $n-\kappa$ ecuaciones diferenciales que describen el cambio de la trayectoria inferida $\chi(t)$ en $E(t)$:

$$\dot{\chi}(t) = f_c[\chi, u(t), r], \quad \chi(0) = \chi_0 \neq x_0, \quad \chi \in E(t) \quad (\text{A12})$$

del cual se obtendrá una trayectoria $\chi(t)$ que exponencialmente (E) converge a la trayectoria de la planta $x(t)$ si $x^*(t)$ es E-estable y el estado inicial del estimador χ_0 esta lo suficientemente cerca del estado inicial de la planta x_0 .

En una implementación práctica, las trayectorias de las salida y entrada aumentadas [$y(t)$ y $x_u(t)$] deben ser estimadas con un procesador dinámico de señales tipo filtro y, por lo tanto, el estimador auxiliar debe tolerar errores en sus trayectorias. Por esta razón se requiere que la trayectoria no observable sea “bounded-input bounded-state (BIBS)” estable.

De la construcción del estimador auxiliar se tiene la siguiente noción de estimabilidad (observabilidad/detectabilidad) en forma de la siguiente definición:

Definición 1. La planta (Ec. 1) es RE-estimable si hay m enteros (índices de estimabilidad) $\kappa_1, \dots, \kappa_m$ (tal que $\kappa_1 + \dots + \kappa_m = \kappa \leq n$, $\kappa_i > 0$) y un mapa “suave” $\phi_{II}(x, x_u, r) = [\phi_{i+1}, \dots, \phi_n]^T$ tal que, en el espacio S:

i) el mapa de estimabilidad ϕ :

$$\phi(x, x_u, r) = [\phi_I(x, x_u, r), \phi_{II}(x, x_u, r)]^T \quad (\phi_I \text{ definido en Ec. 6.a})$$

es Rx-invertible y Lipschitz (L) continuo con respecto a x_u .

ii) el mapa φ (definido en Ec. 6.b) es L-continuo con respecto a x, x_u y v .

iii) la trayectoria de la dinámica no observable de dimensión $n-\kappa$ es RE-estable.

Si $\kappa = n$, $\phi = \phi_I$, no existiendo dinámica no observable [$\dim E(t) = 0$], y la condición (iii) es trivialmente conocida; entonces se dice que la planta es RE-observable. De lo contrario, si $\kappa < n$, se dice que la planta es RE-detectable.

Construcción del Estimador de Estados.

Del punto (i) de la Def. 1, se puede establecer la existencia de una transformación o cambio de coordenadas de la forma:

$$z = \phi_a(x, x_u, r) \quad (\text{A13})$$

Nota: Ver definiciones de matrices y mapas no lineales en el apéndice complementario A.1.

Donde x_u puede ser considerado como el estado de un exo-sistema cuya dinámica será (diferenciando A7.a):

$$\dot{x}_u = [\dot{u}_1, \dots, u_1^{(v_1)}; \dots; \dot{u}_p, \dots, u_p^{(v_p)}]^T \quad (A14)$$

y ya que las únicas señales que se tienen de este exo-sistema son $u(t)$, éste se representa adecuadamente por el siguiente sistema:

$$\dot{x}_u = \Gamma_u x_u + \Pi_u v(t), \quad u = \Delta_u x_u \quad (A15.a)$$

Entonces, el exo-sistema (A15.a) junto con la planta (A1):

$$\dot{x} = f[x, \Delta_u x_u, r], \quad y = h(x, r) \quad (A15.b)$$

se puede decir que es una planta “aumentada”.

Por lo tanto, el cambio de coordenadas adecuado es de la forma:

$$z = \phi_a(x, x_u, r), \quad z = [z_u^T, z_I^T, z_{II}^T]^T, \quad \phi_a(x, x_u, r) = [x_u, \phi_I^T(x, x_u, r), \phi_{II}^T(x, x_u, r)]^T \quad (A16)$$

Aplicando (A16) en (A15), se obtiene que la dinámica de la planta (aumentada) en el nuevo sistema coordenado curvilíneo (también en \mathbf{R}^n) es:

$$\dot{z}_u = \Gamma_u z_u + \Pi_u v(t), \quad u = \Delta_u x_u \quad \dim z_u = v \quad (A17.a)$$

$$\dot{z}_I = \Gamma_o z_I + \Pi_o \theta[z, v(t)], \quad y = \Delta_o z_I, \quad \dim z_I = \kappa \quad (A17.b)$$

$$\dot{z}_{II} = w[z, v(t)] \quad \dim z_{II} = n - \kappa \quad (A17.c)$$

Se puede notar que la dinámica que corresponde al sistema exógeno y a la dinámica de la parte observable de la planta son sistemas “casi-lineales”. Y ya que los pares de matrices (Γ_u, Δ_u) y (Γ_o, Δ_o) cumplen con la condición de estimabilidad lineal, además de que el mapa θ es L-continuo (ya que el mapa φ lo es), se pueden considerar los siguientes sistemas como estimadores candidatos para el sistema exógeno y la parte observable de la planta en las nuevas coordenadas curvilíneas:

$$\dot{\zeta}_u = \Gamma_u \zeta_u + K_u (u - \Delta_u \zeta_u), \quad v = \Delta_u \zeta_u, \quad K_u \in K_u \quad (A18.a)$$

$$\dot{\zeta}_I = \Gamma_o \zeta_I + \Pi_o \theta[\zeta, v(t)] + K_o (y - \Delta_o \zeta_I), \quad \psi = \Delta_o \zeta_I \quad K_o \in K_o \quad (A18.b)$$

donde K_u y K_o son matrices de bloque diagonal de ganancias.

Y, para parte no observable se tendrá un detector de la forma:

$$\dot{\zeta}_{II} = w[\zeta, v(t)] \quad (A18.c)$$

donde $\xi = [\xi_u^T, \xi_I^T, \xi_{II}^T]^T$.

Ya habiendo obtenido el estimador apropiado, lo que resta es transformarlo a coordenadas originales ($\xi \longrightarrow \chi$). Para el exo-sistema la transformación es simple ya que $x_u = z_u$, y para el estimador al aplicar la inversa de la transformación (A16) al estimador (A18), se tiene que en coordenadas originales:

$$\dot{\chi}_u = A_u \chi_u + K_u u \quad (\text{A19.a})$$

$$\dot{\chi} = f(\chi, \Delta_u \chi_u, \rho) + G(\chi, \chi_u, \rho, K_o)[y - h(\chi)] \quad (\text{A19.b})$$

donde:

$$G(\chi, \chi_u, \rho, K_o) = \Theta_I(\chi, \chi_u, \rho) K_o, \quad [\Theta_I(\chi, \chi_u, \rho), \Theta_{II}(\chi, \chi_u, \rho)] = \phi_x^{-1}(\chi, \chi_u, \rho) \quad (\text{A19.c})$$

A este estimador, por su acción proporcional será nombrado Estimador-P

Sintonización.

Al restar a la planta aumentada (A17) su estimador candidato, se obtiene que la dinámica del error de estimación es la siguiente:

$$\dot{e}_u = A_u e_u + v(t), \quad v = \Delta_u e_u = u - \Delta_u \chi_u \quad (\text{A20.a})$$

$$\dot{e}_I = A_o e_I + \Pi q_I [e, v(t), e_r, t], \quad \eta = \Delta_o e_I = y - h(\chi) \quad (\text{A20.b})$$

$$\dot{e}_{II} = \omega(e_{II}, t) + q_{II} [e, v(t), e_r, t] \quad (\text{A20.c})$$

donde:

$$A_u = \Gamma_u - K_u \Delta_u, \quad A_o = \Gamma_o - K_o \Delta_o \quad (\text{A20.d})$$

Por ahora, por simplicidad, pensemos mejor que la dinámica es dada por el siguiente sistema básico:

$$\dot{e}_u = A_u e_u + v(t), \quad v = \Delta_u e_u = \Delta_u \chi_u - u \quad (\text{A21.a})$$

$$\dot{e}_I = A_o e_I, \quad \eta = \Delta_o e_I = h(\chi) - y \quad (\text{A21.b})$$

$$\dot{e}_{II} = \omega(e_{II}, t) \quad (\text{A21.c})$$

Puede notarse que (A21.c) es una dinámica de error no observable; y el sistema (A21) está sujeto a perturbaciones exógenas y de retroalimentación: $v(t)$, q_I y q_{II} . Tal sistema consiste de tres subsistemas E-estables desacoplados y cuya dinámica de error de estimación de las salidas es:

$$v_i^{(v_i)} + k_{l,i}^u v_i^{(v_i-1)} + \dots + k_{v_i,i}^u v_i = 0, \quad 0 \leq i \leq p \quad (\text{A22.a})$$

$$\eta_i^{(\kappa_i)} + k_{l,i}^o \eta_i^{(\kappa_i-1)} + \dots + k_{\kappa_i,i}^o \eta_i = 0, \quad 0 \leq i \leq m \quad (\text{A22.b})$$

Esta se obtiene al tomar la κ_i -ésima derivada de (A21.a)

En estos sistemas lineales, la i -ésima salida es independiente de las otras, y sus polos (valores característicos) pueden ser puestos arbitrariamente en el lado estable del plano complejo

al dar valores adecuados a las ganancias ($k_{j,i}^{u/o}$). Se dice entonces que estas dinámicas son lineales, no interactivas y de polos asignables (LNPA).

De lo anterior, entonces las ganancias ($k_{j,i}^{u/o}$) deben ser escogidas de tal manera que hagan estable y convergente las dinámicas de error de estimación y por lo tanto el estimador.

En virtud de la estabilidad de las matrices A_u y A_o , existen pares de factores positivos de amplitud-decaimientos, (a_u, λ_u) y (a_o, λ_o) , tal que:

$$\|\exp(A_u t)\| \leq a_u \exp(-\lambda_u t), \quad a_u, \lambda_u > 0 \quad (\text{A23.a})$$

$$\|\exp(A_o t)\| \leq a_o \exp(-\lambda_o t), \quad a_o, \lambda_o > 0 \quad (\text{A23.b})$$

Y ya que las perturbaciones (v, q_l, q_{ll}) están limitadas (cerradas), para asegurar la RE-convergencia de los estados estimados, la clave es sintonizar las ganancias del estimador tal que el cociente entre el factor de amplitud y de decaimiento (λ_u/a_u y λ_o/a_o) sea lo suficientemente grande. Esto puede interpretarse que la dinámica (A22) debe converger suficientemente rápido, entonces ya habiendo escogido las ganancias para que la dinámica sea estable, para hacerla más rápida se escalan las dinámicas a los tiempos $s_u t$ y $s_o t$, obteniéndose las siguientes sistemas parametrizados:

$$v_i^{(v_i)} + s_u k_{1,i}^u v_i^{(v_i-1)} + \dots + s_u^{v_i} k_{v_i,i}^u v_i = 0, \quad 0 \leq i \leq p, \quad s_u > 0 \quad (\text{A24.a})$$

$$\eta_i^{(k_i)} + s_o k_{1,i}^o \eta_i^{(k_i-1)} + \dots + s_o^{k_i} k_{k_i,i}^o \eta_i = 0, \quad 0 \leq i \leq m, \quad s_o > 0 \quad (\text{A24.b})$$

Entonces, lo que se necesita escoger lo suficientemente grande es s_u y/o s_o . Comparando (A24) con (A22), la forma parametrizada del Estimador-P (A21) es:

$$\dot{\chi}_u = A_u^s \chi_u + K_u^s u \quad (\text{A27.a})$$

$$\dot{\chi} = f(\chi, \Delta_u \chi_u, \rho) + G(\chi, \chi_u, \rho, K_o^s)[y - h(\chi)] \quad (\text{A27.b})$$

donde:

$$A_u^s = \Gamma_u - K_u^s \Delta_u \quad (\text{A27.c})$$

$$G(\chi, \chi_u, \rho, K_o^s) = \Theta_I(\chi, \chi_u, \rho) K_o^s, \quad [\Theta_I(\chi, \chi_u, \rho), \Theta_{II}(\chi, \chi_u, \rho)] := \phi_x^{-1}(\chi, \chi_u, \rho) \quad (\text{A27.d})$$

El estimador será E-convergente (p. ej. sin sesgo entre el estado de la planta y el estimado) cuando las mediciones no tengan ruido, el filtro del exo-sistema (A19.a) sea perfecto ($e_u = 0$) y los parámetros del modelo y la planta coincidan ($e_r = 0$).

Cuando el Estimador-P no es E-convergente (p. ej. los parámetros del modelo y los de la planta no coinciden) se recomienda implementar una acción integral en el estimador. Esto se hace adicionando la acción integral al estimador candidato en coordenadas-z (A18.b):

$$\dot{\zeta}_1 = \Gamma_o \zeta_1 + \Pi_o 0[\zeta, v(t)] + K_o (y - \Delta_o \zeta_1) + K_I \Pi_o \int_0^t (y - \Delta_o \zeta_1) d\tau, \quad K_I \in K_I \quad (\text{A28})$$

donde K_I es una matriz de bloque diagonal de ganancias, las cuales se escogen de tal manera que la dinámica LNPA de error de estimación de salidas sea estable:

$$\eta_i^{(\kappa_i+1)} + k_{1,i}^o \eta_i^{(\kappa_i)} + \dots + k_{\kappa_i,i}^o \dot{\eta}_i + k_i^I \eta_i = 0, \quad 0 \leq i \leq m \quad (\text{A29})$$

la cual también es escalada a un tiempo $s_0 t$:

$$\eta_i^{(\kappa_i+1)} + s_0 k_{1,i}^o \eta_i^{(\kappa_i)} + \dots + s_0^{\kappa_i} k_{\kappa_i,i}^o \dot{\eta}_i + s_0^{\kappa_i+1} k_i^I \eta_i = 0, \quad 0 \leq i \leq m \quad (\text{A30})$$

Y, después de hacer la transformación a coordenadas originales, el Estimador-PI (nombrado así por su acción proporcional + integral) ya parametrizado que se obtiene es:

$$\dot{\chi} = f(\chi, \Delta_u \chi_u, \rho) + G(\chi, \chi_u, \rho, K_o^s) [y - h(\chi)] + G_I(\chi, \chi_u, \rho, K_I^s) \int_0^t [y - h(\chi)] dt \quad (\text{A31.a})$$

donde:

$$G_I(\chi, \chi_u, \rho, K_I^s) = \Theta_1(\chi, \chi_u, \rho) \Pi_o K_I^s \quad (\text{A31.b})$$

Subapéndice II.A

Definición de Matrices, Vectores y Mapas No Lineales

- Diseño del Observador de la Planta.

$$\Gamma_o = \begin{bmatrix} \Gamma_1^o & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \Gamma_m^o \end{bmatrix}, \dim \Gamma_o = n \times n \quad \Gamma_i^o = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}, \dim \Gamma_i^o = \kappa_i \times \kappa_i$$

$$\Pi_o = \begin{bmatrix} \Pi_1^o & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \Pi_m^o \end{bmatrix}, \dim \Pi_o = n \times m \quad \Pi_i^o = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \dim \Pi_i^o = \kappa_i \times 1$$

$$\Delta_o = \begin{bmatrix} \delta_1^o & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \delta_m^o \end{bmatrix}, \dim \Delta_o = m \times n \quad \delta_i^o = [1, 0, \dots, 0], \dim \delta_i^o = 1 \times \kappa_i$$

$$K_o = \begin{bmatrix} k_1^o & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & k_m^o \end{bmatrix}, \dim K_o = n \times m \quad k_i^o = \begin{bmatrix} k_{1,i}^o \\ \vdots \\ k_{\kappa_i,i}^o \end{bmatrix}, \dim k_i^o = \kappa_i \times 1$$

$$K_o^s = \begin{bmatrix} k_1^{o,s} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & k_m^{o,s} \end{bmatrix}, \dim K_o^s = n \times m \quad k_i^{o,s} = \begin{bmatrix} s_o k_{1,i}^o \\ \vdots \\ s_o^{\kappa_i} k_{\kappa_i,i}^o \end{bmatrix}, \dim k_i^{o,s} = \kappa_i \times 1$$

$$K_I = \begin{bmatrix} k_1^I & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & k_m^I \end{bmatrix}, \dim K_I = m \times m \quad K_I^s = \begin{bmatrix} s_o^{\kappa_1+1} k_1^I & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & s_o^{\kappa_m+1} k_m^I \end{bmatrix}, \dim K_I^s = m \times m$$

- Diseño del Exo-Observador.

$$\Gamma_u = \begin{bmatrix} \Gamma_1^u & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \Gamma_p^u \end{bmatrix}, \dim \Gamma_u = v \times v \quad \Gamma_i^u = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}, \dim \Gamma_i^u = v_i \times v_i$$

$$\begin{aligned} \Pi_u &= \begin{bmatrix} \Pi_1^u & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \Pi_p^u \end{bmatrix}, \dim \Pi_u = v \times p & \Pi_i^u &= \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \dim \Pi_i^u = v_i \times 1 \\ \Delta_u &= \begin{bmatrix} \delta_1^u & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \delta_p^u \end{bmatrix}, \dim \Delta_u = p \times v & \delta_i^u &= [1, 0, \dots, 0], \dim \delta_i^u = 1 \times v_i \\ K_u &= \begin{bmatrix} k_1^u & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & k_p^u \end{bmatrix}, \dim K_u = v \times p & k_i^u &= \begin{bmatrix} k_{1,i}^u \\ \vdots \\ k_{v_i,i}^u \end{bmatrix}, \dim k_i^u = v_i \times 1 \\ K_u^s &= \begin{bmatrix} k_1^{u,s} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & k_p^{u,s} \end{bmatrix}, \dim K_u^s = v \times p & k_i^{u,s} &= \begin{bmatrix} s_u k_{1,i}^u \\ \vdots \\ s_u^{v_i} k_{v_i,i}^u \end{bmatrix}, \dim k_i^{u,s} = v_i \times 1 \end{aligned}$$

- Mapas No Lineales.

$$\theta[z, v(t)] = \varphi[\phi^{-1}(z), v(t)]$$

$$w[z, v(t)] = \left[\left(\frac{\partial \phi_{II}}{\partial x} \right) f + \left(\frac{\partial \phi_{II}}{\partial u} \right) (\Gamma_u x_u + \Pi_u v) \right]_{x=\phi^{-1}(z), x_u=z_u}$$

$$q_I(e_u, e_I, e_{II}, v, t) = \theta[z_u(t)+e_u, z_I(t)+e_I, z_{II}(t)+e_{II}, v(t)] - \theta[z_u(t), z_I(t), z_{II}(t), v(t)]$$

$$q_{II}(e_u, e_I, e_{II}, v, t) = w[z_u(t)+e_u, z_I(t)+e_I, z_{II}(t)+e_{II}, v(t)] - w[z_u(t), z_I(t), z_{II}(t)+e_{II}, v(t)]$$

$$w(e_{II}, v, t) = w[z_u(t), z_I(t), z_{II}(t), v(t)] - w[z_u(t), z_I(t), z_{II}(t), v(t)]$$

BIBLIOGRAFIA

Aguilar, L. R., "Análisis de la Operación y Control en un Reactor por Lote para la Polimerización de n-Butadieno," Tesis de Maestría en Ing. Química, UAM-I, México, D.F., (1993).

Alvarez, J., R. Suarez, y A. Sanchez, "Nonlinear Decoupling Control of Free-Radical Polymerization Continuous Stirred Tank Reactors," *Chem. Engng. Sci.*, **45**(11), (1990).

Alvarez, J., R. Suarez, y F. Vargas, "Nonlinear Control of Molecular Weight Distribution in a Polymerization Reactor," *Proc. IFAC Proc. Symp. on Contr. Design Methods*, **2**, 534, (1992)

Alvarez, J., R. Suarez, y A. Sanchez, "Semiglobal Nonlinear Control Based On Complete Input-Output Linearization and its Application to the Start-Up of a Continuous Polymerization Reactor," *Chem. Engng. Sci.*, **49**(21), (1994).

Alvarez, J., "Output-Feedback Control of Nonlinear Plants," *AIChE J*, **42**(9), (1996).

Alvarez, J., "A Robust State Estimator Design for Nonlinear Plants," *Proc. Am. Contr. Conf.*, **5**, 3058, (1997).

Alvarez, J., "Nonlinear State Estimation with Robust Convergence," En Revisión para *Int. J. of Process Control*, (1998).

Biesenberger, J. A., y D. H. Sebastian, "Principles of Polymerization Engineering," *Krieger Pub. C.*, Florida, (1993).

Balke, S. T., y A. Hamielec, "Bulk Polymerization of Methyl Methacrylate," *J. of App. Polym. Sci.*, **17**, 905, (1973).

Cardenas, J. N., y J. O'Driscoll, "HighConversion Polymerization - I. Theory and Application to Methyl Methacrylate," *J. Polym. Sci., Polym. Chem. Ed.*, **14**, 893, (1976).

Cardenas, J. N., y J. O'Driscoll, "HighConversion Polymerization - II. Influence of Chain Transfer on the Gel Effect," *J. Polym. Sci., Polym. Chem. Ed.*, **15**, 1883, (1977).

Cicarella, G., M. D. Mora y A. Germani, "A Luenbergerlike Observer for Nonlinear Systems," *Int. J. Control*, **57**(3), (1993).

Chiu, W.Y., G. M. Carrat, y D. G. Soong, "A Computational Model for the Gel Effect in Free-Radical Polymerization," *Macromolecules*, **16**(3), (1983).

Crowley, T. J., y K. Y. Choi, "Calculation of Molecular Weight Distribution from Molecular Weight Moments in Free Radical Polymerization," *Ind. Engng. Chem. Res.*, **36**(5), (1997).

Deza, F., E. Busvelle, J. P. Gauthier y D. Rakotopara, "High Gain Estimation for Nonlinear Systems," *Systems and Control Letters*, **18**, 295, (1992).

- Dotson, N. A., R. Galván, R. L. Laurence, y M. Tirrell, "Polymerization Process Modeling," *VCH Publishers*, USA (1996).
- Elicabe, G. E., y G. R. Meira, "Estimation and Control in Polymerization Reactors," *Polym. Engng. and Sci.*, **28**(3), (1988).
- Ellis, M. F., T. W. Taylor, V. Gonzalez, y K. F. Jensen, "Estimation of the Molecular Weight Distribution in Batch Polymerization," *AIChE J*, **34**(8), (1988).
- Ellis, M. F., T. W. Taylor, y K. F. Jensen, "On-line Molecular Weight Distribution Estimation and Control in Batch Polymerization," *AIChE J*, **40**(3), (1994).
- Gao, J., y A. Penlidis; "A Comprehensive Simulator/Database Package for Reviewing FreeRadical Homopolymerizations," *J. M. S. - Rev. Macromol. Chem. Phys.*, **C36**(2), (1996).
- Gelb, A; "Applied Optimal Estimation"; *The M.I.T. Press*, (1979).
- Griffin, C. D., y D. V. Croson, "Kalman Filtering Applied to a Reagent Feed System," *Chem. Engng. Progress*, (1988).
- Hamer, J. W., T. A. Akramov, y W. H. Ray, "The Dynamic Behavior of Continuous Polymerization Reactors-II," *Chem. Engng. Sci.*, **36**(12), (1981).
- Hernández, E., "Control No Lineal de un Reactor de Polimerización," Tesis de Maestría en Ing. Química, UAM-I, México, D.F., (1987).
- Isidori, A., "Nonlinear Control Systems," *Springer-Verlag*, New York, (1995).
- Jaisinghani, R., y W. H. Ray, "On the Dynamic Behavior of a Class of Homogeneous Continuous Stirred Tank Polymerization Reactors," *Chem. Engng. Sci.*, **32**, 811, (1977).
- Kailath, T., "Linear Systems," *Prentice-Hall*, New Jersey, (1980).
- Krener, A., y A. Isidori, "Linearization by Output Injection and Nonlinear Observers," *Systems and Control Letters*, **3**, 47, (1983).
- Krener, A., y A. Respondek, "Nonlinear Observers with Linearizable Error Dynamics," *SIAM J. Control and Optimization*, **23**(2), (1985).
- Kuo, B. C., "Digital Control Systems," *Saunders College Publishing*, USA, (1992)
- Kwakernak, H., y R. Sivan, "Linear Optimal Control Systems," *Wiley-Interscience*, N.Y., (1972).
- Litchfield, R. J., K. S. Campbell, y A. Locke, "The Application of Several Kalman Filters to the Control of a Real Chemical Reactor," *TransIChemE.*, **57**, 113, (1979).

- Lopez, T., y J. Alvarez, "State Estimation of a Continuous Solution Copolymer Reactor," *Proc. IFAC ADCHEM Symp.*, 213, (1997).
- Meditch, J. S., "Stochastic Optimal Linear Estimation and Control," *McGraw-Hill*, New York, (1969).
- Moraal, P. E., y J. W. Grizzle, "Observer Design for Nonlinear Systems with Discrete Time Measurements," *IEEE Trans. on Automatic Control*, **40**(3), (1995).
- Mutha, R. K., W. R. Cluett, y A. Penlidis, "A New Multirate-Measurement-Based Estimator: Emulsion Copolymerization Batch Reactor Case Study," *Ind. Engng. Chem. Res.*, **36**(4), (1997a).
- Mutha, R. K., W. R. Cluett y A. Penlidis, "On-Line Nonlinear Model-Based Estimation and Control of a Polymer Reactor," *AIChE J.*, **43**(11), (1997b).
- Padilla, S., y J. Alvarez, "Control of Continuous Copolymer Reactors," *AIChE J.*, **43**(2), (1997).
- Ray, W. H., "Polymerization Reactor Control," *IEEE Control Systems Magazine*, **6**(4), (1986).
- Ray, W. H., "On the Mathematical Modeling of Polymerization Reactors," *J. Macromol. Sci.-Revs. Macromol. Chem.*, **C8**(1), (1972).
- Schmidt, A. D., y W. H. Ray, "The Dynamic Behavior of Continuous Polymerization Reactors-I," *Chem. Engng. Sci.*, **36**, (1981).
- Schuler, H., y Z. Suzhen, "Real-Time Estimation of the Chain Length Distribution in a Polymerization Reactor," *Chem. Engng. Sci.*, **40**(10), (1985).
- Schuler, H., y S. Papadopoulou, "Real-Time Estimation of the Chain Length Distribution in a Polymerization Reactor – II. Comparison of Estimated and Measured Distribution Functions," *Chem. Engng. Sci.*, **41**(10), (1986).
- Seth, V., y S. K. Gupta, "Free Radical Polymerizations Associated with the Trommsdorff Effect Under Semibatch Reactor Conditions: An Improved Model," *J. of Polym. Engng.*, **15**(3-4), (1995/6).
- Slotine, J. E., J. K. Hedrick, y E. A. Misawa, "On Sliding Observers for Nonlinear Systems," *J. of Dyn. Systems, Meas. and Contr.*, **109**, 245, (1987).
- Tsinias, J., "Further Results on the Observer Design Problem," *Systems and Control Letters*, **20**, 411, (1990).
- Tulig, T. J., y M. Tirrell, "Toward a molecular Theory of the Trommsdorff Effect," *Macromolecules*, **14**(5), (1981).
- Uribe, M., "Los Polímeros: Síntesis y Caracterización," *Noriega Editores*, México, (1990).

Vidyasagar, M., "Nonlinear Systems Analysis," *Prentice-Hall*, New York, (1978).

Wang, G.-B., S.-S. Peng y H.-P. Huang, "A Sliding Observer for Nonlinear Process Control," *Chem. Engng. Sci.*, **52**(5), 1997.