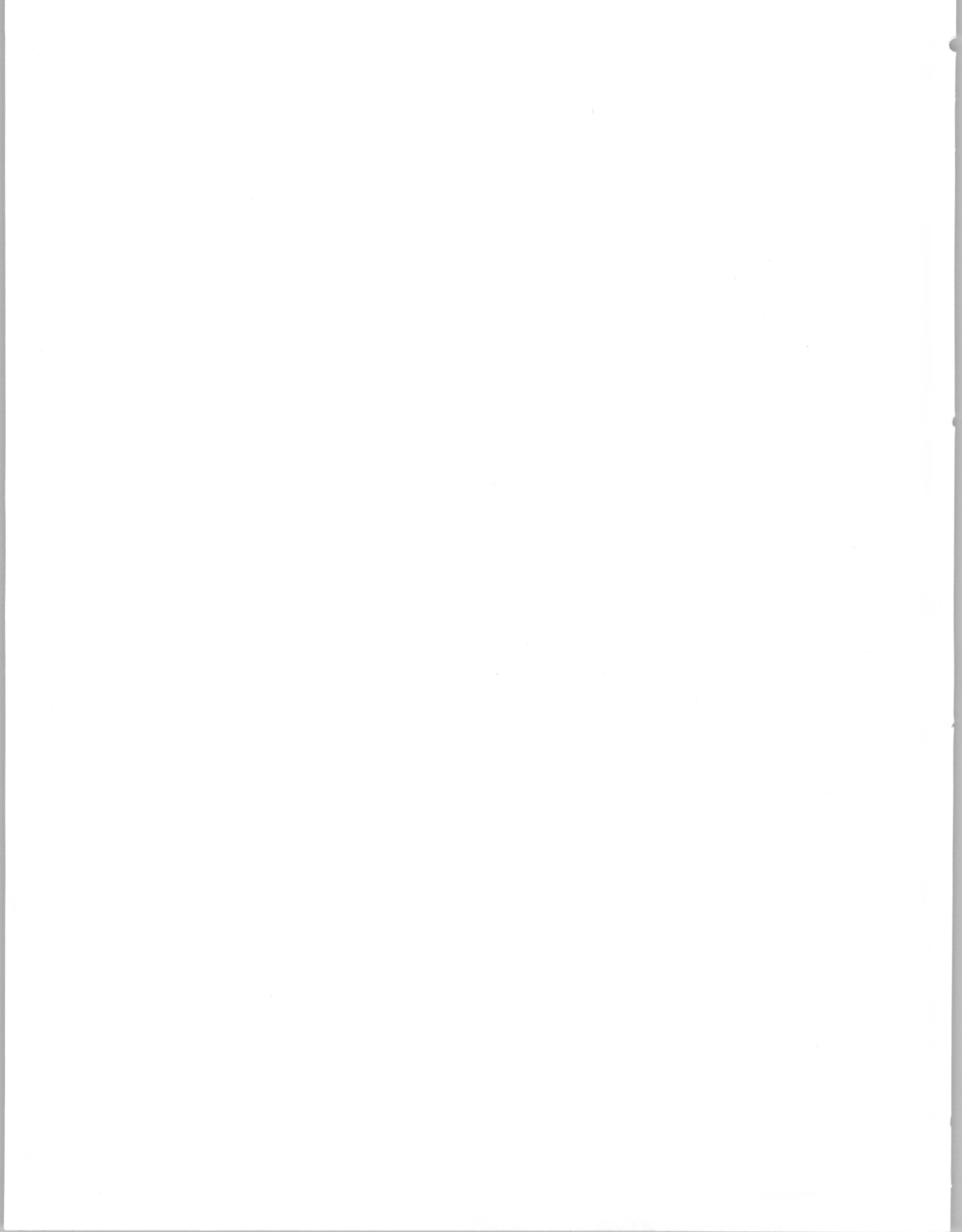


Diseño de la estructura de estimación de composiciones para columnas de destilación binaria: un enfoque geométrico.

Tesis que para obtener el grado de **Doctor en Ciencias** presenta el

MIQ. Carlos Rubén Fernández Zavala

México, D.F. a 2 de Julio de 2009.





DISEÑO DE LA ESTRUCTURA DE ESTIMACIÓN DE COMPOSICIONES PARA COLUMNAS DE DESTILACIÓN BINARIA: UN ENFOQUE GEOMÉTRICO

Tesis que presenta el

MIQ. Carlos Rubén Fernández Zavala

Para obtener el grado de
Doctor en Ciencias

Asesor: Dr. Jesús Álvarez Calderón

Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica

Julio de 2009



Universidad del Pacífico

DISEÑO DE LA ESTRUCTURA DE ESTIMACION DE COMPOSICIONES PARA COLUMNAS DE DESTILACION BINARIAS: UN ENFOQUE GEOMETRICO

Tesis que presenta el

MIO. Carlos Rueda Fernandez Zúñiga

Para obtener el grado de

Doctor en Ciencias

Asesor: Dr. José Alvarado Rodríguez

Universidad Nacional Agraria La Molina, Lima, Perú

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica

Lima, julio de 2009

Miembros del jurado

Presidente:

Dr. José de Jesús Álvarez Ramírez (UAM Iztapalapa)

Secretario:

Dr. Jesús Álvarez Calderón (UAM Iztapalapa)

Vocales:

Dr. Arturo Jiménez Gutierrez (Instituto Tecnológico de Celaya)

Dr. Jaime A. Moreno Pérez (UNAM)

Dr. Héctor F. Puebla Nuñez (UAM Azcapotzalco)

Comité de redacción

Presidente

Dr. Juan de los Ríos Álvarez, Universidad de Sevilla

Vicepresidente

Dr. Jesús Álvarez, Universidad de Sevilla

Miembros

Dr. Antonio J. Pérez López, Universidad de Sevilla

Dr. Antonio M. García, Universidad de Sevilla

Dr. Héctor F. Rueda Naranjo, Universidad de Sevilla

Resumen

En esta tesis se estudia el problema de estimación de composiciones en la clase de columnas de destilación con mezclas binarias, en base a la combinación de un modelo con mediciones de temperatura, atendiendo a objetivos específicos de estimación y frente a las características físicas y termodinámicas de la columna. El problema de diseño incluye: (i) *la estructura* (modelo completo o truncado, número de mediciones de temperatura y su ubicación, así como el mecanismo de asimilación y transmisión de la información de las mediciones), (ii) y *el algoritmo* (elección, construcción y sintonización del procesador dinámico de datos que realiza la tarea de estimación).

El punto de partida metodológico es el reciente rediseño del estimador geométrico (del tipo Luenberger o alta ganancia no-lineal) que tiene: (i) a la estructura como grado de libertad, (ii) procedimiento sistemático de sintonización para cualquier estructura, y (iii) se puede implementar con jacobianos del modelo en vez de las derivadas direccionales de alto orden. Específicamente, en esta tesis se abordan dos problemas. El *primer problema* consiste en valorar los siguientes resultados obtenidos mediante estudio teórico (Álvarez y Fernández, 2009) con datos experimentales: (i) la factibilidad de implementar un *estimador no lineal del tipo Luenberger* sin calcular *derivadas direccionales* (que en caso del sistema experimental empleado en este trabajo son doce y a sabiendas que no se puede ir más allá de tres) y (ii) la equivalencia entre el estimador geométrico y el filtro extendido de Kalman. El *segundo problema* consiste en diseñar la estructura de estimación, que para un objetivo específico de estimación (v.g. perfil completo o parcial, dos efluentes o un efluente), logra el mejor desempeño del algoritmo en términos de velocidad de reconstrucción y robustez.

En el diseño estructural se incluyen como grados de libertad: (i) la elección de modelo o parte de él, (ii) el número de mediciones y su ubicación, y (iii) el mecanismo de asimilación y transmisión de la información desde las mediciones de temperatura

hasta las concentraciones de interés. Como un aspecto importante del trabajo se diseña y realizan corridas experimentales para probar, validar e ilustrar la metodología propuesta.

Tabla de contenido

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 <i>Prefacio</i>	3
1.2 <i>Técnicas de estimación</i>	8
1.3 <i>Selección de estructura</i>	11
1.4 <i>Número y ubicación de mediciones</i>	13
1.5 <i>Objetivo de la tesis</i>	18
2. EL PROBLEMA DE ESTIMACIÓN	21
2.1 <i>Introducción</i>	23
2.2 <i>Columna de destilación binaria</i>	23
2.2.1 <i>Modelo de estimación</i>	28
2.3 <i>Estimación no lineal</i>	29
2.3.1 <i>Noción general de un estimador</i>	30
2.3.2 <i>Estimador geométrico original (EGO)</i>	32
2.3.3 <i>Estimador geométrico rediseñado (EG)</i>	35
2.3.4 <i>Estimador geométrico con desacoplamiento en la innovación</i>	36
2.3.5 <i>Filtro extendido de Kalman (FEK)</i>	38
2.3.6 <i>Estimador geométrico estocástico (EGE)</i>	40
2.4 <i>Formulación del problema de estimación</i>	41
2.5 <i>Experimentos</i>	43
2.5.1 <i>Equipo</i>	43
2.5.2 <i>Corrida experimental</i>	47
2.6 <i>Características de las columnas de destilación</i>	51
2.7 <i>Resumen</i>	54

3. VERIFICACION DEL ESTIMADOR GEOMETRICO REDISEÑADO	57
3.1 <i>Técnicas de estimación no lineal en la columna</i>	59
3.1.1 Estimador geométrico original	60
3.1.2 Estimador geométrico rediseñado	61
3.1.3. Filtro Extendido de Kalman	63
3.1.4 Sintonización	64
3.2 <i>Estimación basada en modelo completo con innovación en todas las etapas</i>	65
3.2.1 Estimación con una medición de temperatura	66
3.2.2 Estimación con dos mediciones de temperatura	68
3.2.3 Estimación con innovación desacoplada	72
3.3 <i>Estimación con modelo truncado e innovación parcial</i>	74
3.3.1 Estimación en la sección de rectificación.	75
3.3.2 Estimación de la composición de los efluentes	78
3.4 <i>Resultados</i>	81
4. ESTRATEGIA ESTRUCTURAL	83
4.1 <i>Enfoque estructural</i>	85
4.2 <i>Estructuras de Estimación</i>	85
4.3 <i>Estimación en sistemas por etapas</i>	88
4.3.1 Tipos de módulos y características	90
4.4 <i>Medidas de detectabilidad y ubicación de mediciones</i>	94
4.4.1 Medidas para el presente trabajo	95
4.4.2 Medidas en trabajos previos	96
4.5 <i>Resumen de la estrategia de estimación</i>	97
5. ANÁLISIS ESTRUCTURAL	99
5.1 <i>Caracterización estructural</i>	101
5.2. <i>Estructura con una medición</i>	101
5.3. <i>Estructuras con múltiples mediciones</i>	107
5.4 <i>Resultados</i>	111

6. RESULTADOS ESTRUCTURALES	115
6.1 <i>Estimación geométrica</i>	117
6.1.1 Perfil completo	117
6.1.2 Efluentes	127
6.2 <i>Estimación con filtro extendido de Kalman</i>	131
6.3 <i>Resultados</i>	135
CONCLUSIONES	137
REFERENCIAS	141
APÉNDICES	153
<i>Apéndice A: Notación</i>	155
<i>Apéndice B: Relaciones funcionales</i>	161
<i>Apéndice C: Instrucciones de arranque y operación del sistema experimental</i>	165
<i>Apéndice D: Parámetros y condiciones de operación del sistema experimental</i>	169
<i>Apéndice E: Nociones de observabilidad</i>	171
<i>Apéndice F: Índices de observabilidad de un sistema no lineal</i>	173
<i>Apéndice G: Ganancias para el estimador geométrico</i>	175

Lista de tablas:

Tabla 1.1: Trabajos en estimación no lineal de composiciones de columnas de destilación.	7
Tabla 1.2: Trabajos sobre ubicación de sensores en sistemas no lineales de alta dimensionalidad.	15

Lista de figuras:

Figura 2.1. Representación de los flujos dentro de una columna de destilación	25
Figura 2.2. Sistema experimental	44
Figura 2.3. Dimensiones de una sección de la columna de destilación experimental	45
Figura 2.4. Esquema de la columna de destilación experimental	46
Figura 2.5. Evolución del perfil de temperaturas en la trayectoria experimental	48
Figura 2.6. Predicciones en la evolución de las composiciones del modelo contra los datos experimentales	49
Figura 2.7. Comportamientos en el equilibrio líquido vapor para mezclas binarias	52
Figura 3.1. Estimación de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico y el filtro extendido de Kalman convencional, usando una medición e innovando en todas las etapas	67
Figura 3.2. Error de estimación para la inferencia de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico y el filtro extendido de Kalman convencional, usando una medición e innovando en todas las etapas	68
Figura 3.3. Estimación de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico, el filtro extendido de Kalman equivalente al geométrico y el filtro extendido de Kalman convencional, usando dos mediciones e innovando en todas las etapas	69
Figura 3.4. Error de estimación para la inferencia de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico, el filtro extendido de Kalman equivalente al geométrico y el filtro extendido de Kalman convencional, usando dos mediciones e innovando en todas las etapas	70
Figura 3.5. Predicción del error de estimación para la inferencia de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico estocástico, el filtro extendido de Kalman geométrico y el filtro extendido de Kalman convencional, usando dos mediciones e innovando en todas las etapas.	71
Figura 3.6. Estimación de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico, comparando el desempeño del estimador ante desacoplamientos de las innovaciones.	73
Figura 3.7. Error de estimación para la inferencia de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico, comparando el desempeño del estimador ante desacoplamientos de las innovaciones.	74

Figura 3.8. Estimación de perfil de composiciones en la sección de rectificación con el estimador geométrico y el estimador geométrico original, usando una medición e innovando en tres etapas de seis modeladas.	75
Figura 3.9. Error de estimación para la inferencia del perfil de composiciones en la sección de rectificación con el estimador geométrico y el estimador geométrico original, usando una medición e innovando en tres etapas de seis modeladas.	76
Figura 3.10. Normas de la matriz de estimación para la sección de rectificación con el estimador geométrico (O) y el estimador geométrico original (Ω), usando una medición e innovando en tres etapas de seis modeladas.	77
Figura 3.11. Estimación de perfil de composiciones en dos subsistemas de tres etapas cada uno, con el estimador geométrico, el estimador geométrico original y el filtro extendido de Kalman, usando dos mediciones e innovando en tres etapas cada una.	79
Figura 3.12. Error de estimación para la inferencia de las composiciones en dos subsistemas de tres etapas cada uno, con el estimador geométrico, el estimador geométrico original y el filtro extendido de Kalman, usando una medición e innovando en tres etapas en cada subsistema.	80
Figura 4.1. Estructura de estimación definida por Módulos.	87
Figura 4.2. Representación esquemática de las etapas de una la columna de destilación.	89
Figura 4.3. Representación de las conexiones entre etapas y algoritmos de estimación.	91
Figura 4.4. Ejemplo de una estructura de estimación.	92
Figura 4.5. Tipos de desacoplamientos en los módulos.	94
Figura 5.1. Dependencia de la medida de singularidad (μ_s) contra la ubicación del sensor y el orden de estimación usando la matriz de estimación (O)	103
Figura 5.2. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) contra la ubicación del sensor y el orden de estimación usando la matriz de estimación (O)	103
Figura 5.3. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) de la dinámica no innovada contra la ubicación del sensor y el orden de estimación en el $t = 40$ min.	104
Figura 5.4. Dependencia del margen de estabilidad (λ_v) contra la ubicación del sensor y el orden de estimación (O)	104
Figura 5.5. Dependencia de la medida de singularidad (μ_s) contra la ubicación del sensor y el orden de estimación usando la matriz Grammiana (W_o)	105
Figura 5.6. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) contra la ubicación del sensor y el orden de estimación usando la matriz Grammiana (W_o)	105
Figura 5.7. Cambio de temperatura y composición entre etapas y su comparación con la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) para un orden de estimación completo.	106
Figura 5.8. Dependencia de la medida de singularidad (μ_s) con la ubicación de dos mediciones y con innovación completa usando la matriz de estimación (O).	107

Figura 5.9. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) con la ubicación de dos mediciones y con innovación completa usando O .	108
Figura 5.10. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) contra el numero de estados innovados para dos mediciones usando O .	109
Figura 5.11. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c^v) contra el número de estados innovados para dos mediciones.	109
Figura 5.12. Dependencia del margen de estabilidad de la dinámica no innovada (λ_v) contra el número de estados innovados para dos mediciones.	110
Figura 5.13. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) y de la medida de singularidad (μ_s) contra el número de mediciones óptimamente ubicadas usando O .	111
Figura 6.1. Estimación de perfil de composiciones con el estimador geométrico para tres estructuras de estimación usando dos mediciones y el modelo completo de la columna.	120
Figura 6.2. Error de estimación para la inferencia del perfil de composiciones con el estimador geométrico para tres estructuras de estimación usando dos mediciones y modelo completo	121
Figura 6.3. Estimación de perfil de composiciones con el estimador geométrico para dos estructuras de estimación: a) con innovación mínima y usando cuatro mediciones; y b) con innovación parcial con dos mediciones e innovando en tres etapas por cada medición.	123
Figura 6.4. Error de estimación para la inferencia del perfil de composiciones con el estimador geométrico para dos estructuras: a) con innovación mínima y usando cuatro mediciones; y b) con innovación parcial con dos mediciones e innovando en tres etapas por cada medición.	124
Figura 6.5. Estimación de perfil de composiciones con el estimador geométrico para la peor estructura de estimación	126
Figura 6.6. Error de estimación para la inferencia del perfil de composiciones con el estimador geométrico para la peor estructura de estimación	127
Figura 6.7. Estimación de las composiciones de los efluentes con el estimador geométrico para una estructuras de estimación con innovación en una etapa por medición y usando dos mediciones con un modelo truncado.	129
Figura 6.8. Error de estimación para la inferencia de las composiciones en los efluentes con el estimador geométrico para una estructuras de estimación con innovación en una etapa por medición y un modelo truncado.	130
Figura 6.9. Estimación de perfil de composiciones con la mejor estructura encontrada comparando el estimador geométrico contra una versión reducida del filtro extendido de Kalman.	133
Figura 6.10. Error de estimación para la inferencia del perfil de composiciones con la mejor estructura encontrada comparando el estimador geométrico contra una versión reducida del filtro extendido de Kalman.	134

1. INTRODUCCIÓN

Basándose en una reseña crítica del estado del arte en los campos de estimación de columnas de destilación en particular y de estimación de procesos químicos en general, en este capítulo se motiva y justifica los problemas estudiados y las contribuciones generadas en esta tesis: (i) la validación con simulación y experimentación del rediseño teórico del estimador geométrico de propósito general (la remoción del obstáculo de las derivadas direccionales, la equivalencia con el filtro extendido de Kalman (FEK) y la capacidad de estimar la incertidumbre con el estimador geométrico), y (ii) derivación y validación experimental de un procedimiento para la determinación de la mejor estructura de estimación para un cierto objetivo de estimación (perfil de composiciones completo o parcial, uno o ambas composiciones de los efluentes).

1. INTRODUCCIÓN

El análisis de una resaca crítica del estado del arte de los métodos de cálculo de columnas de destribo en particular y de estructuras de procesos dinámicos en general en este capítulo se muestra a través de los ejemplos de cálculos y las contribuciones generadas en este trabajo. (i) La metodología de análisis y experimental en el diseño de la estructura, como sea de propósito general (la relación del cálculo de las derivadas de las ecuaciones de movimiento con el estado de la estructura (EES) y la capacidad de evaluar la estabilidad del estimador geométrico) y (ii) la relación y validación experimental de un procedimiento para la determinación de la rigidez efectiva de las columnas de destribo de cálculo de la capacidad de comparación con los métodos de cálculo de las composiciones de los efectos.

1.1 Prefacio

Dentro de los procesos por etapas, el más antiguo y empleado es el proceso de destilación. Prácticamente todas las sustancias naturales y las obtenidas en reactores químicos son mezclas que no tienen las propiedades requeridas para ser usadas directamente. Estas mezclas deben ser separadas en componentes o grupos de componentes para su uso final (Petlyuk, 2004). La destilación se encuentra entre las operaciones unitarias más importantes en la industria química en general. Se usa ampliamente en la industria petroquímica, refinación, farmacéutica, de pinturas, de bebidas, cosmética, de alimentos y perfumera. Como consecuencia de esto, el manejo y monitoreo adecuado de las columnas de destilación tiene un gran impacto económico en la industria (Luyben, 1990; Kister, 1990; Quintero-Marmol y col. 1991; Perry, 1997; Stichlmair y Fair, 1998, Petlyuk, 2004, Mujtaba, 2004). Esta operación unitaria es quizá la más utilizada en toda la industria de procesos químicos de separación porque tiene una razón *costo/beneficio* más baja que cualquier otra técnica de separación (Buckley, 1985; Kister, 1990; Mujtaba, 2004), pero tiene el problema de que si se trabaja en condiciones poco adecuadas, consume grandes cantidades de energía. Por lo anterior es muy importante operar las columnas de destilación en forma eficiente. Más importante aún, la destilación es casi exclusivamente responsable de la pureza y uniformidad de los productos de la industria química (Buckley, 1985; Kister, 1990; Stichlmair y Fair, 1998; Petlyuk, 2004). Esto hace que los problemas asociados de diseño de equipo, proceso, operación y automatización relacionados cobren mayor importancia en un esquema de producción global con demandas crecientes en índices de productividad, calidad, seguridad y protección ambiental. Como consecuencia, el monitoreo y control de las columnas de destilación tiene un gran impacto económico y por lo tanto, si se lograran estrategias de monitoreo y control más eficientes, se obtendrían beneficios económicos importantes (Nisenfeld, 1981; Buckley, 1985; Castellanos-Sahagún, 2005).

En muchas aplicaciones a nivel práctico, se tiene el objetivo de combinar el conocimiento que se tiene *a priori* de las características físicas de un sistema con

datos experimentales para proporcionar estimados en línea de las propiedades de interés de ese sistema (Bastin y Gevers, 1988). La operación y control de sistemas de procesos distribuidos por etapas, tales como columnas de destilación, absorción, destilación reactiva, reactores tubulares con flujo pistón, entre otros, requiere información precisa sobre la distribución espacial (en algún punto o en todo el equipo) de las variables de interés (composiciones, temperaturas, flujos, etc.). En general esta información está disponible solamente a través de un limitado número de pocas posibilidades, que además son costosas (Baratti y col., 1995; Vande Wouwer y col., 2000; Alonso y col., 2004). Generalmente estas alternativas también tiene grandes tiempos de respuesta, como lo son los cromatógrafos para determinar las composiciones de una mezcla a destilar (Baratti y col., 1995 y 1998).

El problema de estimación en columnas de destilación consiste en la inferencia de la evolución del perfil de composiciones en base un *algoritmo de estimación*. Éste consiste en un sistema dinámico (descrito por los estados del sistema) con *dos partes*: (i) *una predictiva* que en base al modelo, determina una tasa de cambio de las composiciones y (ii) *una correctiva* que en base a la diferencia entre la temperatura medida y la predicha por el modelo (innovación), multiplicada por una ganancia (no-lineal), ajusta el valor de la tasa de cambio de las composiciones. Debido al uso de información real del proceso, un estimador bien diseñado tiene una capacidad descriptiva y hasta predictiva que el modelo (una aproximación razonable del proceso) por sí sola no tiene (Álvarez y Fernández, 2009). Mediante el uso de modelos matemáticos e inyección de información mediante algunas mediciones indirectas y económicas, como lo son temperaturas, se ha logrado exitosamente inferir las composiciones en una destilación binaria o multicomponente en columnas de operación continua o por lotes (Joseph y Brosilow, 1978; Yu y Luyben, 1987; Lang y Gilles, 1990; Quintero y col., 1991; Deza y col., 1992; Mejdell y Skogestad, 1991a, 1991b y 1993; Fernández, 1996; Baratti y col., 1995 y 1998; Shin y col, 1999 y 2000; Oisiovici y Cruz, 2000 y 2001; Venkateswarlu y Avantika, 2001; Tronci y col., 2005, Venkateswarlu y Kumar, 2006; Pulis, 2007).

De los trabajos anteriores y de los que se muestran en la tabla 1.1 se puede mencionar que: (i) las columnas de destilación tienen grandes proporciones entre estados (composiciones en las etapas) y mediciones (temperatura de cada etapa), significando *altos índices de observabilidad* (Marino y Tomei, 1995; ver apéndice F); (ii) el mejor desempeño en un estimador ha sido obtenido con el filtro extendido de Kalman (Gelb, 1974), incluyendo para sistemas multicomponentes; (iii) los métodos de estimación no lineal tipo Luenberger, (Zeitz, 1987; Ciccarella y col. 1993; Khalil, 2002; Álvarez, 2000) han sido poco aplicados debido a la imposibilidad de calcular los altos ordenes del sistema (Tronci y col., 2005; Röbenack, 2005 y 2007), y los que se han sido aplicados (Deza y col., 1991; Targi y col., 2001; Hammouri y col., 2002) usan mediciones de composición con sistemas ideales (volatilidad relativa constante); (iv) prácticamente la mayoría de trabajos no aborda el problema de ubicación de mediciones, y solamente extienden criterios de control ubicando las mediciones en las etapas más sensibles, es decir etapas con mayores cambios durante la operación (Tolliver y McCune, 1980); (v) el diseño del estimador involucra decisiones estructurales (ubicación y número de mediciones), de selección del algoritmo de estimación (filtro extendido de Kalman, estimador tipo Luenberger, por ejemplo), y el tipo de modelo (completo, parcial o reducido), y se ha omitido una valoración de la estructura en este sentido; (vi) algunas técnicas de reducción de modelo (por ejemplo regresión de mínimos cuadrados parciales: Mejdell y Skogestad, 1991b; Zamprogna y col., 2004; modelos de ondas: Shin y col., 2000; Roffel y col., 2003; o compactamentalización de modelos; Yang y Lee, 1997) han sido empleados; (vii) el modelo de las columnas de destilación binaria es observable con al menos una medición de temperatura (Quintero-Marmol y Luyben, 1987); (viii) el perfil de composiciones en una columna de destilación binaria ha sido estimado comúnmente usando dos mediciones de temperatura ubicadas en cada sección de la columna (rectificación y agotamiento), localizadas en platos lo suficientemente sensibles a cambios de operación; y (ix) la selección del número y ubicación de mediciones aún es un tema abierto a la investigación, a pesar de los esfuerzos de buscar criterios de ubicación de sensores (Hahn y Edgar, 2002; Alonso y col., 2004; Singh y Hahn, 2004 y 2005b).

En la literatura teórica se han propuesto varias metodologías de inferencia de estados, como lo son el filtro extendido de Kalman (Gelb, 1974) dentro de las técnicas de estimación estocástica y variantes del tipo Luenberger (Zeit, 1987; Ciccarella y col. 1993; Khalil, 2002; Álvarez, 2000) que no requieren ningún conocimiento estocástico del proceso. El estimador más empleado en procesos de ingeniería química es el filtro extendido de Kalman (Wang y col., 1997; Kazantzis y Kravaris, 2000). En la siguiente sección de este trabajo se describen sus características, ventajas y desventajas. Casi todas ellas se han aplicado a sistemas relativamente simples como reactores, en el sentido de la dimensión del sistema, es decir un número pequeño de estados en el modelo. En el caso de destilación, el filtro extendido de Kalman es el más utilizado y recomendado, teniendo un funcionamiento robusto en procesos continuos (Baratti y col., 1995 y 1998) y por lotes (Osiović y Cruz, 2000 y 2001), ver tabla 1.1. Se ha usado con modelo completamente detallado con la dinámica de hidráulica de plato constante o en cuasi estado estacionario. Para la sintonización del filtro extendido de Kalman se requiere experiencia, ya sea con técnicas de optimización (Baratti y col., 1993) ó manuales a prueba y error, y no es muy fácil de realizar, además los parámetros del estimador son sólo una variable de ajuste sin significado estadístico o físico y el cálculo de la incertidumbre no ha sido explotado por la idea generalizada de que se pierde en el paso lineal al no lineal en el diseño de la técnica.

La familia de estimadores del tipo de Luenberger [alta ganancia para sistemas completamente observables (Zeit, 1987; Targui y col., 2001; Hammouri y col., 2002), geométrico para detectables (Álvarez, 2000; López y Álvarez, 2004)] no se puede aplicar directamente por la dificultad de calcular las derivadas direccionales de Lie para sistemas de alta dimensionalidad, que para destilación se ha calculado hasta tres (Tronci y col., 2005) y en procesos en general hasta cinco (Röbenack, 2005 y 2007). Ésta es la razón por la que son poco recomendados. Se han desarrollado algunas técnicas bastante *ad hoc* y no muy sistemáticas para aplicarlos a columnas de destilación, pero sólo aplican a estimadores con mediciones de la composición de la mezcla a separar (Deza y col., 1992; Hammouri y col., 2002).

Tabla 1.1: Trabajos en estimación no lineal de composiciones de columnas de destilación.

<i>Autores y año</i>	<i>Modelo</i>	<i>Innovación</i>	<i>Experimental</i>	<i>Estimador</i>	<i>Mediciones</i>	<i>Sintonía</i>	<i>Selección de sensores</i>	<i>Selección de estructura</i>
Lang y Gilles (1990)	Completo	Completa	No	Tipo Luenberger ganancia cte.	Temperatura en 1 ó 2 etapas	No	No	No
Quintero-Marmol y col. (1991)	Completo	Completa	No	Tipo Luenberger ganancia cte.	Temperatura en 2 etapas	Si	No	No
Deza y Gauthier (1991)	Completo	Completa	No	Tipo Luenberger de alta ganancia	Composiciones y flujos	Si	No	No
Mejdell y Skogestad (1991a)	Completo	Completa	No	Mínimos cuadrados parciales (PLS)	Temperatura en todas la etapas	No	No	No
Mejdell y Skogestad (1991b)	Completo	Completa	Si	PLS	Temperatura en todas la etapas	No	No	No
Deza y col. (1992)	Completo	Completa	No	Aproximación de alta ganancia	Composición en 2 etapas	Si	No	No
Mejdell y Skogestad (1993)	Reducido	Completa	No	Regresión (PCR) y Filtro de Kalman	Temperatura todas la etapas	No	No	No
Bertucco y col. (1995)	Completo	Completa	Si	Filtro extendido de Kalman (EKF)	Temperatura en 2 etapas	No	No	No
Baratti y col (1995)	Completo	Completa	Si	Filtro extendido de Kalman (EKF)	Temperatura en 2 etapas	Si	No	No
Balasubramhanya y Doyle (1997)	Reducido	Completa	No	EKF	Temperatura en 2 etapas	No	No	No
Yang y Lee (1997)	Reducido	Completa	No	EKF	Temperatura en 2 etapas	No	No	No
Baratti y col (1998)	Completo	Completa	Si	EKF	Temperatura en 3 etapas	Si	No	No
Abdel-Jabbar y col., (1998)	Completo	Completa	No	EKF por módulos	Temperatura por módulo	No	No	Si
Shin y col. (1999)	Reducido	Completa	No	PLS y PCR	Temperaturas y Flujos	No	Si	Si
Park y Han (2000)	Reducido	Completa	No	Regresión localmente pesada	Temperaturas	No	No	No
Shin y col. (2000)	Reducido	Completa	No	Tipo Luenberger ganancia cte.	Temperaturas y Flujos	No	No	No
Oisiovici y Cruz (2000)	Completo	Completa	No	EKF	Temperaturas en 4 y 7 etapas	No	No	No
Oisiovici y Cruz (2001)	Completo	Completa	No	EKF	Temperaturas en 8 etapas	No	Si	No
Venkateswarlu y Avantika (2001)	Completo	Completa	No	EKF y F. de Kalman adaptivo (AFKF)	Temperatura en 2, 3 ó 5 etapas	No	No	No
Targui y col. (2001)	Completo	Completa	No	Tipo Luenberger de alta ganancia	Composiciones y flujos	Si	No	No
Hammouri y col. (2002)	Completo	Completa	No	Tipo Luenberger de alta ganancia	Composiciones	Si	No	No
Hahn y Edgar (2002)	Reducido	No	No	A lazo abierto	No	No	No	Si
Roffel y col., (2003)	Reducido	Completa	No	PLS	Temperatura en 2 etapas	No	Si	No
Zamprogna y col., (2004)	Reducido	Completa	No	PLS	Temperaturas	No	No	No
Singh y Hahn (2004)	Completo	Completa	No	Tipo Luenberger de alta ganancia	Composiciones	No	Si	No
Zamprogna y col., (2005)	Reducido	Completa	No	PLS	Temperaturas	No	Si	No
Tronci y col. (2005)	Completo	Parcial	No	Tipo Luenberger: geométrico	Temperaturas	Si	No	No
Singh y Hahn (2005a)	Completo	Parcial	No	Tipo Luenberger de alta ganancia	Composiciones en 5 etapas	Si	Si	No

Tabla 1.1: Continuación.

<i>Autores y año</i>	<i>Modelo</i>	<i>Innovación</i>	<i>Experimental</i>	<i>Estimador</i>	<i>Mediciones</i>	<i>Sintonía</i>	<i>Selección de sensores</i>	<i>Selección de estructura</i>
Venkateswarlu y Kumar (2006)	Completo	Completa	No	EKF	Temperatura en 2 etapas	No	Si	No
Jana y col., (2006)	Completo	Parcial	No	EKF, Observador adaptivo	Composición en 2 etapas	Si	No	No
Bian y Henson (2006)	Parcial	Completa	No	EKF	Temperatura en 6 etapas	No	Si	No
Pulis y col., (2006)	Completo	Parcial	Si	Tipo Luenberger: geométrico	Temperatura en 1, ó 2 etapas	Si	Si	No
Kaewpradit y col. (2008)	Reducido	Parcial	No	EKF	Temperatura en 2 etapas	No	No	No
Álvarez y Fernández (2009)	Reducido	Parcial	Si	Tipo Luenberger: geométrico	Temperatura en 1, ó 2 etapas	Si	No	Si

1.2 Técnicas de estimación

La técnica de estimación comúnmente más utilizada en procesos químicos no lineales es el filtro extendido de Kalman (Wang y col., 1997; Kazantzis y Kravaris, 2000). Se ha probado en una amplia clase de procesos y condiciones de operación, dando un buen desempeño. Esta técnica (estocástica) tiene un diseño muy simple y se basa en la minimización de la matriz de covarianza del error de estimación (Gelb, 1974). En columnas de destilación ha llevado a buenos resultados útiles en la operación, ya sea continua o por lotes, binaria o de múltiples componentes, convencional o reactiva (Baratti y col., 1995, 1998; Oisiovici y Cruz, 2000, 2001; Venkateswarlu y Avantika, 2001; Venkateswarlu y Kumar, 2006). Para calcular las ganancias del filtro extendido de Kalman se requiere del cálculo de los jacobianos del sistema (que son fáciles de obtener), de la resolución de las ecuaciones de Riccati (que aumentan notablemente la dimensión del estimador) y la selección de los valores de las matrices de covarianza (que es una tarea difícil). Prácticamente todos los trabajos que lo usan, lo hacen bajo la consideración de sistema completamente observable. Esto implica que la dimensión del estimador es notablemente mayor que la dimensión del sistema original, y puede llevar a malos condicionamientos numéricos en el funcionamiento del estimador ocasionando sesgos en los estimados de composición.

La dimensión de las ecuaciones de Riccati crece de gran manera, conforme aumentan el número de platos y componentes de la mezcla a separar. Además de que la dimensión del filtro extendido de Kalman es grande, tiene esquemas complicados de sintonización y usualmente termina siendo sintonizado a prueba y error, lo que también podría presentar dificultades en la aplicación del estimador. En la sección 2.3.5 de este trabajo se presenta la descripción completa de cómo implementar el filtro extendido de Kalman en un proceso no lineal, y en la sección 3.1.3 se presentan para el caso de una columna de destilación.

Todos los trabajos que usan el filtro extendido de Kalman lo implementan con innovación completa centralizada, a excepción de trabajo de Abdel-Jabbar y col. (1998) que lo hacen con innovación descentralizada (es decir, con desconexiones en la inyección de información de las mediciones). Reportan que funciona bien con menos ecuaciones de Riccati. La idea surge de los diseños descentralizados en control en equipos de gran escala, donde el cálculo de un arreglo de ganancias de forma descentralizada ofrece robustez y simplicidad con respecto a su contra parte centralizada. Esto motiva a explotar y desarrollar la idea en el diseño del estimador, con el fin de dar sustento teórico y poderla hacer más sistemática en su aplicación. La idea de descentralización del trabajo antes mencionado ya tiene tiempo y no le han prestado atención ya que hoy en día no hay limitaciones de cómputo. Sin embargo la motivación para tomar esta idea es la aplicabilidad del estimador con esquemas más simples y robustos en procesos industriales y con fines de control.

Lo anterior ha sido un claro incentivo para la búsqueda de métodos de estimación más simples, o al menos que no tengan que resolver las ecuaciones de Riccati. El filtro extendido de Kalman está completamente desconectado de las demás técnicas de estimación, como las del tipo Luenberger. El problema de alta dimensionalidad del filtro extendido de Kalman ha motivado el desarrollo del técnicas de estimación no lineal tipo Luenberger (Zeitz, 1987; Ciccarella y col. 1993), de alta ganancia (Khalil, 2002; Targui y Hammouri, 2001; Hammouri, 2002) y geométrica (Álvarez, 2000). Los estimadores del tipo Luenberger se han usado poco por el problema de aplicabilidad en sistemas de alto orden, ocasionado por el cálculo de las derivadas de Lie. Estos se

han usado en columnas de destilación con variantes en el diseño de la ganancia para evitar las derivadas de las mediciones. Para evitar las derivadas de Lie, algunos trabajos han usado una variante de ganancia constante (Lang y Gilles, 1990; Quintero-Marmol y col., 1991; Shin y col., 2000a), pero su aplicación está muy limitada a sistemas continuos con pequeños cambios en la operación. Otro método para reducir la complejidad de las derivadas de Lie es considerar que se usan mediciones de composición en el estimador, calculadas a partir de las mediciones de temperaturas (Deza y Gautier, 1991; Deza y col., 1992; Targui y col., 2001; Hammouri y col., 2002), pero esta consideración sólo aplica para sistemas binarios con mezclas ideales (volatilidad relativa constante). Estos trabajos se han desarrollado para plantas completamente observables y no es claro qué hacer para implementar un estimador con innovación parcial, es decir tener etapas a lazo abierto, o cómo implementar una innovación descentralizada. Básicamente, hay una diversidad de técnicas y esquemas de sintonía que carecen de conexión e interpretación mutua, y además la selección de la estructura de estimación (modelo, ubicación y número de sensores) y los problemas del diseño del algoritmo se han realizado por separado. Sin embargo dentro de los estimadores del tipo Luenberger, hay algunos trabajos que consideran el diseño de un estimador para sistemas detectables (Sing y Hanh, 2005a; Tronci y col., 2005; Pulis y col., 2006; Álvarez y Fernández, 2009), lo que permite descartar o no innovar en estados pobremente observables. El estimador geométrico (Álvarez, 2000; López y Álvarez, 2004; Álvarez y Fernández, 2009) extiende a los estimadores tipo Luenberger a sistemas detectables, permite la detectabilidad robusta y da como grado de libertad la selección del modelo (completo o parte de él), grado de centralización en la innovación (centralizada, parcialmente descentralizada o descentralizada) y permite explotar las características del sistema frente a objetivos específicos de estimación. Estos trabajos tienen una conexión entre el diseño de la estructura y el desempeño del estimador y se ha aplicado a columnas de destilación binaria (Álvarez y Fernández, 2009), sin abordar el problema de la selección del número y ubicación de las mediciones. Este último trabajo propone una aproximación en términos de los jacobianos del sistema para evitar el cálculo de las derivadas de las mediciones. En las secciones 2.3.2, 2.3.3 y 2.3.4 de este trabajo se presentan las descripciones completas

de cómo implementar el estimador geométrico y sus variantes en procesos no lineales, y en la sección 3.1.1 y 3.1.2 se presentan para el caso de una columna de destilación binaria. En la presente tesis se verifica la validez de la simplificación propuesta por Álvarez y Fernández (2009) para hacer aplicable las técnicas de estimación no-lineal tipo Luenberger a columnas de destilación. Estas consideraciones motivan el actual estudio con énfasis a la búsqueda de la mejor estructura y algoritmo de estimación.

1.3 Selección de estructura

La estructura de estimación, en este trabajo de tesis, está conformada por el modelo (completo o truncado), las mediciones de temperatura (su número y ubicación), y el mecanismo de asimilación y transmisión de la información de las mediciones. En la literatura se han abordado sólo parte de este problema (sólo determinar la ubicación de sensores) y se ha trabajado por separado del algoritmos de estimación, y los pocos que lo tratan lo ven de manera desconectada al estimador (ver tabla 1.2). El problema de seleccionar la mejor estructura de estimación en columnas de destilación es determinar el mejor estimador en un gran espacio de búsqueda. En principio, la selección de la estructura es un problema combinatorio, cuyo número crece muy rápido con el número de etapas y componentes. En la ecuación 1.1 se muestra la expresión para calcular el número de posibles estructuras para diseñar un observador, es decir para inferir todas las composiciones en la columna:

$$S = \sum_{i=1}^m \frac{n!}{(n-i)! i!} \quad (1.1)$$

Donde S es el número de estructuras, n es el número de etapas y m es el número de mediciones. Por ejemplo, para una columna de 10 etapas y con la posibilidad de ubicar de 1 hasta 10 mediciones de temperatura, tenemos 1,023 estructuras; para una columna de 45 etapas con la posibilidad de colocar 1 medición tenemos 45

estructuras y para la misma columna tenemos 990 estructuras con 2 mediciones ó 14,190 estructuras para 3 mediciones (Joseph y Brosilow, 1978).

Es importante mencionar que la búsqueda de la mejor estructura de estimación se puede hacer desde una computadora minimizando el error de predicción (composiciones en etapas con o sin medición de temperatura), pero su implementación en un proceso en tiempo real resulta prohibitiva por las limitaciones que existen en los equipos industriales (por ejemplo en la implementación de PLCs: controladores lógicos programables) y el tiempo que se requiere para evaluar todas las posibles estructuras. A medida de que se tienen más etapas y más mediciones, el número de posibles estructuras crece significativamente, y se hace inmanejable el evaluar cada estructura debido al número tan grande de posibilidades con un método de optimización (Singh y Hahn, 2006). Una alternativa que se emplea en la presente tesis para evitar evaluar todas las posibilidades es valorar las estructuras con una medición en forma individual, explotando la naturaleza de proceso por etapas de la columna y usando medidas de estimabilidad (López y Álvarez, 2004) adaptadas al estimador geométrico rediseñado. Esta técnica puede no llevar al esquema óptimo, pero permite llegar de manera simple a una estructura con un desempeño satisfactorio cercano al óptimo.

En el diseño de control óptimo robusto de acuerdo con el método constructivo (Sepulchre y col., 1997; Krstić y col., 1990), se puede manejar fácilmente un conjunto de estructuras candidatos con la combinación de herramientas de análisis geométrico y de propagación de error, en base a características específicas de los sistemas. Estas ideas han sido desarrolladas mayormente en el contexto de problemas de control para sistemas mecánicos, y han sido aplicadas recientemente a control de columnas de destilación (Castellanos y col., 2005; Castellanos y Álvarez 2006, Castellanos y col., 2006) y para estimación y control en reactores de polimerización (López y Álvarez, 2004; González y Álvarez, 2005; Álvarez y González 2006). Dentro de esta línea de pensamiento constructivo, el método geométrico de estimación con estructura ajustable se ha desarrollado en el contexto de sistemas con relaciones pequeñas entre estados y mediciones, como reactores químicos (Álvarez 2004; López y Álvarez,

2004). Una ventaja de este método es que no necesita resolver las ecuaciones de Riccati, como lo hace el filtro extendido de Kalman. Recientemente (Álvarez y Fernández, 2009) se ha removido el obstáculo de la aplicabilidad del estimador geométrico a sistemas de alto orden de estimación, y el estimador geométrico se ha conectado formalmente con el filtro extendido de Kalman. Estas consideraciones son puntos de partida para el actual estudio.

La búsqueda de una estructura de estimación cercana a la óptima sobre un gran número de posibilidades, basada en un enfoque constructivo, debe ser realizada explotando (i) la naturaleza por etapas de la columna de destilación, (ii) sus correspondientes balances de materia, (iii) las características termodinámicas de la mezcla a separar, (iv) el marco teórico de estimación geométrica que la conecta y considera conjuntamente aspectos estructurales y algorítmicos, y (v) la sistematicidad de la construcción y la sintonización de la técnica geométrica de estimación.

1.4 Número y ubicación de mediciones

La mayor parte de los estudios se han dedicado a buscar solamente la ubicación y número de sensores, sin tratar la elección del modelo y del estimador. Con las teorías existentes, la tarea de la selección del número y ubicación de mediciones de temperatura en la columna es compleja porque depende de la propiedad de observabilidad/detectabilidad (Krener y Respondek, 1985; Sontag, 1998) del sistema, y está en función de las características termodinámicas de la mezcla a separar y de las características de la columna. Yu y Luyben (1987) determinan que el número mínimo de mediciones de temperatura a ser usadas en un estimador es igual al número de componentes menos uno, y esto lo determinan mediante un análisis de grados de libertad, precisando qué variables son conocidas en la operación, y calculando cuantas mediciones de temperatura se necesitan para encontrar una solución en un balance de materia estático.

Aunque con pocas mediciones de temperatura se logra reconstruir el perfil completo de composiciones, esto no necesariamente indica que sea lo mejor para el desempeño de un estimador (Mejdell y Skogestad, 1991a; Oisiovici y Cruz, 2000). Sin embargo, el uso de un número grande de mediciones con el fin de obtener una mayor exactitud en la tarea de estimación, puede llevar a excesivos cálculos, problemas en la sintonía y a problemas de pobre condicionamiento numérico (Joseph y Brosilow, 1978; Morari y Stephanopoulos, 1980). La inyección de mediciones da al sistema información nueva, sin embargo las mediciones no son perfectas y contienen incertidumbre. La fuente de incertidumbre pueden ser ruido y error en las mediciones, además de presentarse propagación en los errores de modelado del sistema y de las mediciones. El error de estimación (Besançon, 2007) es definido como la diferencia entre la composición verdadera y la estimada con un modelo (usualmente reducido, puesto que no se puede modelar todos los fenómenos del mundo real). En el caso de la columna, las fuentes de generación de los errores tiene que ver con las fluctuaciones de presión, en el flujo y composición de la alimentación, las expresiones de la hidráulica de plato, todas ellas contenidas en la realidad (modelo riguroso: Choe y Luyben, 1987), pero normalmente no consideran en los modelos reportados en la literatura (Luyben, 1990; Kister, 1990; Smith y Corripio, 1994; Stichlmair y Fair, 1998, Petlyuk, 2004).

En la tabla 1.2 se muestran los trabajos en ingeniería química que han abordado el problema de seleccionar el mejor arreglo de mediciones con fines de monitoreo y control en sistemas no lineales de alta dimensión. Esencialmente existen dos enfoques para la selección de la ubicación y número de mediciones con el fin de reducir el error de reconstrucción en las variables inferidas: (i) un enfoque estocástico donde se optimiza cierta medida de observabilidad obtenida a partir de los valores singulares de la matriz de covariancia del error de estimación (Colantuoni y Padmanabhan, 1997; Kumar y Seinfeld, 1978), y (ii) un enfoque determinista que optimiza ciertas medidas obtenidas de los valores propios de la matriz de observabilidad o el gramiano de observabilidad del sistema (Johnson, 1969; Müller y Weber, 1972).

Tabla 1.2: Trabajos sobre ubicación de sensores en sistemas no lineales de alta dimensionalidad.

<i>Autores y año</i>	<i>Criterio de ubicación de sensores</i>	<i>Se valida con un Estimador</i>	<i>Aplicación</i>
Johnson (1969)	Matriz gramiana y de observabilidad	No	
Müller y Weber (1972)	Matriz gramiana	No	
Colantuoni y Padmanabhan (1997)	Optimización sobre matriz de covariación del error	No	Reactores tubulares
Kumar y Seinfeld (1997)	Análisis sobre matriz de covariación del error	No	Reactores tubulares
Harris y MacGregor (1980)	Gramiano	No	Reactores empacados tubulares
Moore (1981)	Análisis de componente principal y gramiano	No	
Álvarez y col. (1981)	Optimización sobre matriz de covariación del error	No	Reactores tubulares
Romagnoli y col. (1981)	Optimización sobre matriz de covariación del error	No	Reactor tubular y columna de destilación
Lau y col. (1985)	Valores singulares en matriz de funciones de transferencia	No	Columnas de destilación binaria
Bagajewicz (1998)	Optimización de costos de sensores	No	
Waldruff y col. (1998)	Optimización sobre matriz gramiana y de observabilidad	No	Reactores tubulares
Kookos y Perkins (1999)	Optimización sobre las desviaciones de los estados	No	Columnas de destilación binaria
Loeblein y Perkins (1999)	Optimización sobre economía dinámica	No	Fraccionadora de fluido catalítico
Vande Wouwer y col. (2000)	Optimización sobre matriz gramiana	No	Reactores catalíticos de lecho fijo
Bhushan y Rengaswamy (2000)	Optimización sobre Diagramas causa efecto	No	Reactores tubulares
van der Berg y col. (2000)	Optimización sobre matriz gramiana	No	Reactores tubulares
van der Berg y col. (2001)	Optimización sobre matriz gramiana	Filtro de Kalman	Reactores tubulares
Antoniades y col. (2002)	Optimización sobre error de estimación	No	Reactores tubulares
Chmielewski y col. (2002)	Optimización sobre error de estimación	No	
Hahn y Edgar (2002)	Reducción mediante gramianos	No	Columna de destilación binaria
Muske y Georgakis (2003)	Optimización sobre función de costos	No	Reactor químico
Alonso y col. (2004a)	Optimización sobre matriz de covariación del error	Observador tipo Luenberger	Reactores tubulares
Alonso y col. (2004b)	Optimización sobre matriz de covariación del error	Observador tipo Luenberger	Reactores tubulares
Singh y Hahn (2004)	Optimización sobre matriz gramiana	No	Columnas de destilación binaria

Tabla 1.2: Continuación.

<i>Autores y año</i>	<i>Criterio de ubicación de sensores</i>	<i>Se valida con un Estimador</i>	<i>Aplicación</i>
Kruger y col. (2005)	Análisis de componente principal y gramiano	No	
Singh y Hahn (2005b)	Optimización sobre matriz gramiana	No	Reactor tubular y columna de destilación
Zamproгна y col. (2005)	Análisis de componente principal en matriz de sensibilidad	Mínimos cuadrados parciales (PLS)	Columna de destilación multicomponente
Bian y Henson (2006)	Análisis de componente principal en matriz de sensibilidad	Filtro extendido de Kalman (EKF)	Columna de destilación binaria
Venkateswarlu y Kumar (2006)	Análisis de componente principal en matriz de sensibilidad	EKF	Columna de destilación reactiva
Muradore y col. (2006)	Regresión multivariable	PLS	Reactores tubulares
Singh y Hahn (2006)	Optimización sobre matriz gramiana	No	Columna de destilación binaria
Brewer y col. (2007)	Análisis de componente principal y gramiano	No	Columna de destilación binaria
Kadu y col. (2008)	Optimización sobre función de costos	EKF	Proceso con reactor y columna de separación

Dentro de los trabajos basados en medidas sobre la matriz de covariancia del error de estimación se han hecho esfuerzos para trabajar con sistemas que tienen ruido en las mediciones y dinámicas no observables (Morari y Stephanopoulos, 1980) y sistemas con estructuras variables de estimación (Álvarez y col., 1981; Romagnoli y col., 1981). En los trabajos que usan la matriz de observabilidad, López y Álvarez (2004) han definido medidas para diseñar la mejor estructura de estimación en sistemas no lineales. Sin embargo, la aplicación de este método está limitada a sistemas de bajo orden.

Existen pocos trabajos que toman en cuenta los costos del sistema de medición (Muske y Georgakis, 2003; Kadu y col., 2008). La reducción del error de reconstrucción en las variables inferidas es el criterio más empleado y se basa en minimizar ciertas medidas de observabilidad sobre la inversa de la matriz de observabilidad del sistema, la matriz de covariancia del error de predicción, o sobre el gramiano de observabilidad del sistema. Usualmente las medidas de observabilidad se

obtienen mediante el cálculo de la traza (producto de los valores singulares), determinante, valor propio máximo, valor singular mínimo, número de condición (valor singular máximo entre el valor singular mínimo) sobre las matrices antes mencionadas. Johnson (1969) concluye que en el caso lineal invariante en tiempo es equivalente usar cualquiera de las matrices (de observabilidad o gramiana). Prácticamente todos los trabajos se basan en encontrar la mejor estructura de estimación y muy pocos validan su resultado con la implementación de un estimador, aunque ya se han probado el observador tipo Luenberger (Alonso y col., 2004a y 2004b) y el filtro extendido de Kalman (Bian y Henson, 2006). Aún no hay ningún resultado que permita seleccionar el algoritmo y la estructura de medición de manera conjunta, y no es nada claro si estará siendo necesaria y efectiva la inyección de información en todo momento.

La razón de evitar la implementación de estimadores en la búsqueda de la ubicación óptima de las mediciones es porque se complica por la sintonización del estimador, y una mala sintonía puede llevar a conclusiones estructurales erróneas. También se evita hacer por la alta dimensionalidad de las posibilidades que genera el problema combinatorio (ver ecuación 1.1). Se han hecho intentos para buscar el óptimo, pero los métodos de optimización que se emplean para encontrarlo son complicados para los procesos por etapas (Vande Woewer y col., 2000; van den Berg y col., 2000 y 2001; Venkateswarlu y Avantika, 2001; Alonso y col., 2004; Singh y Hahn, 2004 y 2005), usualmente están aplicados a sistemas completamente observables, y carecen de una interpretación física.

Un método que da una interpretación física a la búsqueda de las mediciones óptimas es el análisis del componente principal en una matriz de sensibilidad que toma en cuenta los cambios de temperatura con respecto a cambios de composiciones en todas las etapas (Zamproga y col., 2005) y validan el método con la técnica de regresión de mínimos cuadrados parciales. Sin embargo esta técnicas de estimación puede no ser fácil de llevar a la práctica, porque el desarrollo de tal estimador estadístico para columnas de destilación requiere una cantidad muy grande de información previa de la operación del proceso. El análisis del componente principal

en la matriz de covariancia del error también se a usado para la implementación de un filtro extendido de Kalman (Venkateswarlu y Kumar, 2006), pero no ofrece una conexión clara entre el método de ubicación de mediciones y el de estimación. EL filtro extendido de Kalman está basado en la observabilidad y controlabilidad estocástica del tipo gramiano (Gelb, 1974), pero nadie lo ha explotado, ni mencionado.

Evitando los métodos de optimización se ha tomado un criterio heurístico para ubicar los sensores en las zonas de la columna que tengan mayores cambios de temperatura en la operación del equipo (Wood, 1968; Tolliver y McCune, 1980). Este criterio heurístico es bueno, pero puede fallar en ocasiones cuando hay cambios pequeños en temperatura y grandes cambios en composición, como ocurre en mezclas líquidas con grandes desviaciones de la idealidad. Todas las consideraciones anteriores motivan el estudio del diseño conjunto de la estructura y algoritmo en el problema de estimación.

Resumiendo, (i) hasta ahora se ha trabajado con modelo completos de la columna de destilación, (ii) sólo un trabajo implementa el estimador (con filtro extendido de Kalman) con un esquema descentralizada de mediciones (Abdel-Jabbar y col., 1998), (iii) la mayoría hace la ubicación de sensores en un estado estacionario, y (iv) sólo muy pocos verifican la estructura con la implementación de un estimador, sin dejar claro si su resultado depende de la estructura o del esquema de sintonización del estimador, dejando el diseño de la estructura de estimación desconectada del estimador.

1.5 Objetivo de la tesis

En esta tesis se estudia el problema de estimación de composiciones en la clase de columnas de destilación para mezclas binarias, en base a la combinación de un modelo con mediciones de temperatura, atendiendo a objetivos específicos de estimación y frente a las características físicas y termodinámicas de la columna. Los objetivos de

estimación en la columna de destilación pueden ser inferir el perfil completo o parcial de composiciones, una o las dos composiciones de los efluentes.

El problema de diseño incluye: (i) *la selección de la estructura* (modelo completo o truncado, número de mediciones de temperatura y su ubicación, así como el mecanismo de asimilación y transmisión de la información de las mediciones), (ii) y *la selección del algoritmo* (elección, construcción y sintonización del procesador dinámico de datos que realiza la tarea de estimación). El punto de partida metodológico es el reciente rediseño del estimador geométrico del tipo Luenberger o de alta ganancia no-lineal (Álvarez y Fernández, 2009) que tiene: (i) a la estructura como grado de libertad, (ii) procedimiento sistemático de sintonización para cualquier estructura, y (iii) se puede implementar con Jacobianos del modelo en vez de las derivadas direccionales de alto orden. Este método plantea la posibilidad de búsqueda de la mejor estructura de estimación, pero aún no se ha resuelto este rubro.

Específicamente, en esta tesis se abordan dos problemas:

El primer problema consiste en valorar con datos experimentales la factibilidad (derivada teóricamente) de implementar un *estimador no lineal del tipo Luenberger* sin calcular *derivadas direccionales* y de verificar la equivalencia entre el estimador geométrico y el filtro extendido de Kalman. En caso del sistema experimental empleado en este trabajo, las derivadas que se tienen que calcular son doce y se sabe de la literatura que no se puede ir más allá de tres.

El segundo problema consiste en la determinación de la mejor estructura de estimación con fines de monitoreo y control, en el sentido del desempeño del algoritmo, para un objetivo específico de estimación (v.g. perfil completo o parcial, dos efluentes o un efluente), incluyendo como grados de libertad: (i) la elección de modelo o parte de él, (ii) el número de mediciones y su ubicación, y (iii) el mecanismo de asimilación y transmisión de la información de las mediciones.

Esta tesis tiene la finalidad de: (i) validar experimentalmente la versión rediseñada del estimador geométrico de propósito general desarrollado recientemente (Álvarez y

Fernández, 2009) con una clase particular de sistema (columna de destilación binaria), y (ii) encontrar la mejor estructura (tipo de modelo, de algoritmo y de innovación) frente a un objetivo específico de estimación y explicar la conexión entre la estructura y el desempeño del estimador, que a la fecha sigue siendo un tema de investigación abierto.

En base a las ideas de estimación geométrica con estructura de estimación ajustable frente a las características por etapas de la columna: (i) se define la estructura de estimación para columnas en términos de *módulos* (conjunto de etapas adyacentes) con y sin innovación y de módulos innovados con medición en la frontera o en el dominio, (ii) se considera la posibilidad de utilizar todo el modelo de la columna *o parte* de él y (iii) se considera la opción de submodelos y estructuras de innovación descentralizadas. Estos conceptos se plantean en el capítulo 4 de esta tesis.

Finalmente, se resuelve de manera manejable el problema de escoger la *mejor estructura* para objetivos específicos de estimación mediante la combinación de dos etapas: (i) una de análisis estructural con resultados sugerentes y (ii) una de síntesis midiendo el desempeño de la estructura con estimador con resultados concluyentes en términos de funcionamiento con estimador. Los resultados se validan con datos de experimentos realizados en la UAM-I y se describen en la primera parte del trabajo de tesis

2. EL PROBLEMA DE ESTIMACIÓN

En este capítulo se formula el problema de buscar la mejor estructura de estimación en dos pasos: primero se plantea el problema de validar el rediseño del estimador geométrico, con la finalidad de resolver la parte algorítmica del estimador, de manera que su aplicación sea sistemática, fácil de sintonizar y explota la posibilidad de aplicar medidas de observabilidad. Se describen los algoritmos para sistemas no lineales a emplear en este trabajo: (i) el estimador geométrico original y su rediseño, (ii) su variante estocástica y (iii) el filtro extendido de Kalman. También se describe la clase de proceso no lineal para el caso de estudio (columnas de destilación binaria), para finalmente plantear el problema de estimación.

2. EL PROBLEMA DE ESTABILIDAD

En este capítulo se plantea el problema de la estabilidad de un sistema de control en el plano complejo. Se estudia la relación entre la posición de los polos y ceros de la función de transferencia y la estabilidad del sistema. Se introduce el concepto de estabilidad asintótica y se muestra cómo se relaciona con la parte real de los polos. Se discute también el caso de polos en el eje imaginario y se introduce el concepto de estabilidad marginal. Se estudia el efecto de los ceros en la estabilidad y se introduce el concepto de estabilidad de entrada-salida. Se muestra cómo se relaciona con la norma H_2 de la función de transferencia. Se estudia también el caso de sistemas de tiempo discreto y se introduce el concepto de estabilidad en el plano z . Se muestra cómo se relaciona con la parte real de los polos en el plano z .

2.1. Introducción

En este capítulo se presenta la teoría necesaria para el diseño de un estimador, abordando los problemas relacionados con el diseño en la práctica. Como se ha mencionado en la introducción y en los objetivos del presente trabajo, una de las contribuciones de esta tesis corresponde a la parte de aplicación del trabajo de Álvarez y Fernández (2009). La primera parte de dicho trabajo contiene desarrollos teóricos de índole general que pueden ser aplicados a procesos no lineales en general, desarrollos tales como el rediseño del estimador geométrico para ser aplicado a sistemas de alta dimensionalidad, la conexión con el filtro extendido de Kalman y la versión estocástica que permite la estimación de la incertidumbre. Para los efectos de esta tesis, son un punto de partida y se presentan en este capítulo.

También se plantea un modelo matemático general del comportamiento dinámico de una columna de destilación continua binaria, para después hacer la descripción del equipo experimental utilizado en este trabajo. Los experimentos que se hacen están encaminados a la caracterización de la respuesta dinámica del proceso a cambios en escalón en las condiciones de operación, que representan situaciones que normalmente ocurren en el manejo de columnas de destilación. El fin de los experimentos es el validar los esquemas de estimación propuestos en esta tesis.

2.2. Columna de destilación binaria

El proceso de destilación permite separar los componentes de una mezcla líquida en productos puros, mediante la evaporación parcial de la mezcla y de la subsiguiente recuperación del vapor y el líquido restante. Esta operación es posible mientras la mezcla líquida que se calienta emita un vapor con concentración diferente de la del líquido (Petlyuk, 2004).

En las columnas de destilación se establece una contracorriente de líquido-vapor de la mezcla líquida, discontinua en el caso de las columnas de platos (Figura 2.1) o continua para las de relleno (columnas empacadas). En la zona de contacto de las dos fases se da lugar al intercambio de componentes; los más volátiles se acumulan en la fase de vapor que sale por la parte superior de la columna, mientras que los más pesados pasan a la fase líquida, que se extrae por el fondo de la misma. Las columnas empacadas de destilación se pueden modelar de la misma forma que una columna de platos (Kister, 1990), usando el concepto de longitud equivalente a número teórico de platos (HETP, por sus siglas en inglés). Por este motivo, plantearémos únicamente el modelo de una columna de platos. Los modelos dinámicos de columnas de destilación han sido utilizados y descritos ampliamente en la literatura (Stephanopoulos, 1984; Buckley, 1985; Gani y col., 1986; Choe y Luyben, 1987; Luyben, 1990; Kister, 1990; Smith y Corripio, 1994; Perry, 1997; Stichlmair y Fair, 1998, Ingham y col., 2002; Petlyuk, 2004; Mujtaba, 2004).

Para plantear el modelo matemático de la columna de destilación binaria, se considera una mezcla de componentes A (componente volátil) y B (componente pesado), que deben ser separados en dos productos usando una columna de destilación LV (Reflujo/hervidor). La mezcla es alimentada en la columna como líquido saturado (en su punto de burbuja), en la sección de alimentación, con una velocidad de flujo molar F_A (gr-mol/min) y una fracción molar del componente volátil c_A en la etapa n_A . La corriente de vapor es recolectada y completamente condensada, y entonces es devuelta por reflujo parcial (Figura 2.1). El líquido del reflujo es bombeado parcialmente dentro de la columna (plato superior, etapa n) con una velocidad de flujo molar F_R (corriente de reflujo) y es parcialmente removido como el producto de destilado con una velocidad de flujo molar F_D . Llamaremos c_D a la fracción molar del componente volátil en el líquido en el depósito del reflujo. c_D es la composición para el reflujo y la corriente de destilado.

En la base de la columna de destilación, una corriente de producto líquido (el producto del fondo) es removido con una velocidad de flujo F_B y una composición c_B . Una cantidad del líquido es evaporada con una velocidad de flujo molar V en el

hervidor y esta corriente de vapor llega a la parte superior de la columna; asignamos M_B al líquido retenido en el depósito del evaporador. La columna contiene n platos numerados desde abajo hasta la parte superior de la columna. M_i es el líquido acumulado en el i -ésimo etapa, cuya correspondiente composición del componente volátil está representada por c_i .

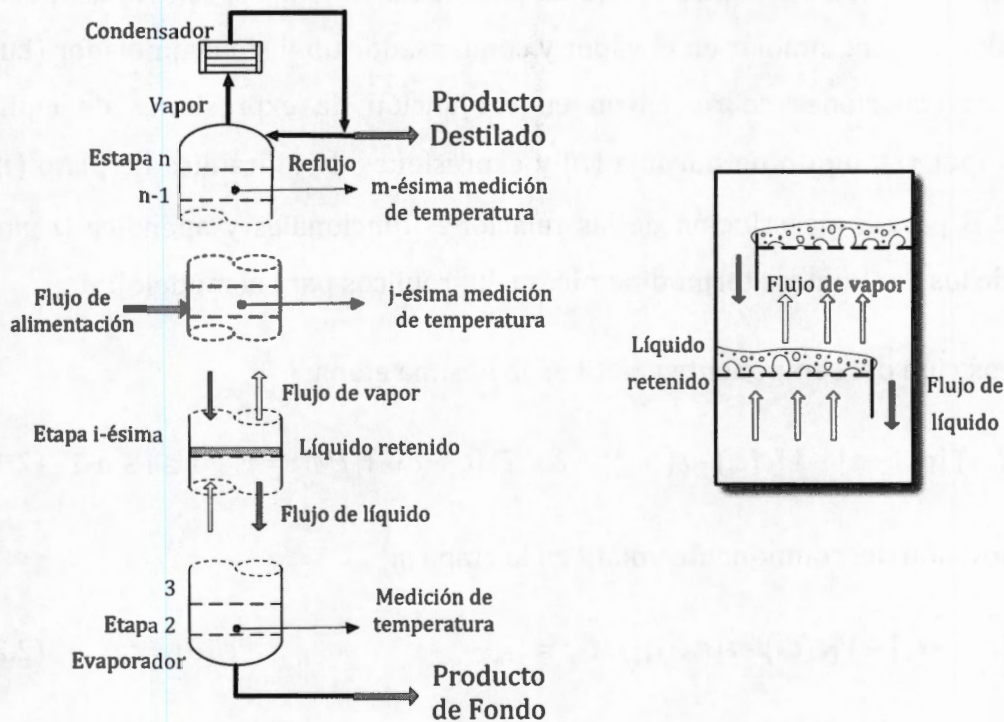


Figura 2.1. Representación de los flujos dentro de una columna de destilación.

La fase de vapor que está acumulada en cada plato se considera despreciable a causa de su baja densidad de masa en comparación con la de la masa de la fase líquida. Por la consideración anterior, también se considera que el vapor que sale de cada etapa prácticamente tiene el mismo valor. El líquido en la misma etapa, está perfectamente mezclado, de manera que las propiedades del líquido que sale del plato son iguales a las del líquido que resta en el mismo. A lo largo de la columna se cuentan con un número m de mediciones de temperatura, donde T_j es la j -ésima medición

ubicada en la π -ésima etapa (en el apéndice A se presenta la notación empleada en esta tesis). La presión en la columna no se controla, y es esencialmente constante desde la parte baja hasta la parte alta, es decir, la caída de presión de un plato a otro es despreciable.

El modelo dinámico de la columna es hecho mediante balances de materia bajo consideraciones estándar de presión constante, equilibrio líquido-vapor en todas la columna, mezcla homogénea en el líquido para todas las etapas, control de nivel en el evaporador, flujo equimolar en el vapor y condensador total sin acumulador (Luyben, 1990). Las ecuaciones se resuelven en conjunción de expresiones de equilibrio líquido-vapor (ε), punto de burbuja (β) y expresiones de hidráulica de plato (η) (ver apéndice B para la descripción de las relaciones funcionales y apéndice D para los valores de los parámetros termodinámicos e hidráulicos para el modelo):

- Composición del componente volátil en la i -ésima etapa:

$$\dot{c}_i = \{\eta(M_{i+1}) [c_{i+1} - c_i] - V[\varepsilon(c_i) - \varepsilon(c_{i-1})] + \delta_{i,n_A} F_A [c_A - c_{A-1}]\} / M_i := F_{c_p} \quad 1 \leq i \leq n-1 \quad (2.1)$$

- Composición del componente volátil en la etapa n :

$$\dot{c}_n = \{F_R [c_{n+1} - c_n] - V[\varepsilon(c_n) - \varepsilon(c_{n-1})]\} / M_n := F_{c_n} \quad c_i(0) = c_o \quad (2.2)$$

- Balance total de masa en la i -ésima etapa:

$$\dot{M}_i = \eta(M_{i+1}) - \eta(M_i) + \delta_{i,n_A} F_A := F_{M_p} \quad 1 \leq i \leq n-1 \quad (2.3)$$

- Balance total de masa en la n -ésima etapa:

$$\dot{M}_n = F_R - \eta(M_n) := F_{M_n} \quad M_i(0) = M_o \quad (2.4)$$

Donde tenemos que para los efluentes $\varepsilon(c_o) = c_1 = c_B$ y $c_{n+1} = \varepsilon(c_n) = c_D$. La hidráulica de plato está dada por la ecuación de Francis: $\eta(M_i) = \alpha(M_i - M_o)^{1.5} = L_i$ (ver apéndice B). δ_{i,n_A} es una delta de Kronecker que denota al plato de alimentación. Para la

temperatura tenemos que $T_j = \beta(c_{\pi_j})$ para $j = 1, \dots, m$. Las expresiones del equilibrio líquido-vapor (ε), punto de burbuja (β) y de la hidráulica de plato (η) se pueden consultar en el apéndice B.

Estrictamente hablando, tenemos funciones desconocidas (q_c , q_M , q_y y q_u) en conjunción con las ecuaciones del modelo de la columna de destilación debido a las consideraciones al plantear el modelo, a la incertidumbre en los parámetros p , al ruido en las mediciones, a los errores de modelado y los errores de medición.

Así el modelo dinámico de la columna esta dado por:

$$\dot{c} = F_c(c, M, u, p) + q_c(c, M, u) \quad (2.5)$$

$$\dot{M} = F_M(M, u, p) + q_M(c, M, u) \quad (2.6)$$

Y para las mediciones y las entradas al sistema tenemos:

$$y = h(c, p) + q_y(c, M)$$

$$y_u = u + q_u(u)$$

Donde los vectores de las funcionalidades están definidas por:

$$c = (c_1, \dots, c_N)', \quad M = (M_1, \dots, M_N)', \quad u = (F_A, c_A, M_1, V, F_R)', \quad F = (F_c, F_M)', \quad y = (y_1, \dots, y_m)'$$

$$F_c = (F_{c_1}, \dots, F_{c_n})', \quad F_M = (F_{M_1}, \dots, F_{M_n})', \quad h(c, p) = [\beta(c_{\pi_1}), \dots, \beta(c_{\pi_m})]', \quad z = g(c, p)$$

y es el vector de la mediciones de temperatura y z es el vector de composiciones que se desea estimar. Los mapas no lineales F_c , F_M , h , q_c , q_M , q_y , y q_u son suaves, $h(c, p)$ (ó u) es la salida actual de temperaturas (ó flujo de entradas), y (ó y_u) es la correspondiente medición (ó entrada), y p es una aproximación de los parámetros reales asociados con los mapas F y h .

Un resultado importante del análisis de estabilidad de procesos es que las columnas de destilación binaria son asintóticamente estables (Rosenbrock, 1962) a

lazo abierto, es decir sin control. No aplica a destilación multicomponente porque la complejidad del modelo aumenta con el número de componentes y etapas. Trabajos posteriores (Doherty y Perkins, 1982; Coffey y col., 2000) muestran que las columnas multicomponentes son estables si hay un control en las puntas de la columna (condensador y evaporador).

2.2.1 Modelo de estimación

Los modelos rigurosos para este tipo de proceso (Choe y Luyben, 1987) consideran la dinámica de los líquidos retenidos en los platos, pero los balances de masa total rara vez son utilizados en modelos con fines de estimación o control. Cuando los cambios en la operación de la columna no son grandes usualmente se supone que la cantidad retenida de líquido en cada etapa se mantiene constante (Alsop y Edgar, 1990; Lang y Gilles, 1990; Deza y col., 1992). Los líquidos retenidos juegan un papel relevante cuando hay cambios grandes en la operación de la columna (Baratti y col., 1995; Fernández, 1996). En una columna típica de destilación, la dinámica de los líquidos retenidos es notablemente más rápida que la dinámica de composiciones (Levy y col., 1969; Betlem, 1998) y consecuentemente, esta dinámica puede ser considerada en régimen de *Cuasi Estado Estacionario* (QSS, por sus siglas en inglés) con respecto a la dinámica de composiciones (Baratti y col., 1995 y 1998; Castellanos-Sahagún, 2005). Así para fines de estimación y la consideración $\dot{M} = 0$, el modelo está dado por:

- Composición del componente volátil en la sección de agotamiento ($1 \leq i \leq n_A$):

$$\dot{\hat{c}}_i = \{(F_R + F_A) [\hat{c}_{i+1} - \hat{c}_i] - V[\varepsilon(\hat{c}_i) - \varepsilon(\hat{c}_{i-1})] + \delta_{i,n_A} F_A [c_A - \hat{c}_{A-1}]\} / \eta^1(F_R + F_A) := f_i \quad (2.7)$$

- Composición del componente volátil en la sección de rectificación ($n_A < i \leq n$):

$$\dot{\hat{c}}_i = \{(F_R) [\hat{c}_{i+1} - \hat{c}_i] - V[\varepsilon(\hat{c}_i) - \varepsilon(\hat{c}_{i-1})]\} / \eta^1(F_R) := f_i \quad (2.8)$$

Donde $\eta^{-1}(L_i) = M_i = M_o + (L_i/\alpha)^{2/3}$ y \hat{c} denota a la composición estimada.

En notación compacta tenemos que el modelo de la columna para fines de estimación es:

$$\dot{\hat{c}} = f(\hat{c}, u, p), \quad \hat{c}(0) = \hat{c}_o \quad (2.9)$$

$$\hat{y} = h(\hat{c}, p) \quad (2.10)$$

Donde \hat{c} (ó \hat{y}) es el vector de las concentraciones estimadas (ó las salidas estimadas de temperaturas) y f es el vector de funcionalidades de acuerdo al modelo aproximado. q_c y q_y engloban a los errores de modelado por las consideraciones de presión constante, equilibrio en todas las etapas, mezclado homogéneo en los platos, flujo equimolar en el vapor, la consideración del cuasi estado estacionario en la dinámica de los líquidos retenidos y los errores en las relaciones funcionales de la hidráulica de plato (η), equilibrio líquido-vapor (ε) y punto de burbuja (β).

Se plantea primero el modelo debido a que la selección del modelo, o parte de él, es de suma importancia en el problema de estimación de las composiciones en la columna de destilación. El objetivo específico del problema de estimación definirá el grado de reducción o truncamiento del modelo de la columna. Este objetivo puede ser inferir el perfil completo o parcial de composiciones, la composición de uno de los efluentes o ambos efluentes (producto destilado y/o de fondo).

2.3. Estimación no lineal

En esta sección se describen los algoritmos de estimación que son empleados en este trabajo con la finalidad de plantear el problema de estimación que se abordará en esta tesis. Primero se describe de forma general a un estimador y posteriormente se presentan las técnicas de estimación geométrica y el filtro extendido de Kalman. Es importante mencionar que en esta tesis se validan los desarrollos teóricos contenidos

en el trabajo de Álvarez y Fernández (2009), que resume y culmina el desarrollo del estimador geométrico. En esta tesis se plantea el problema de validar dicho desarrollo con una columna de destilación con datos experimentales, en el entendido de que (aunque complementarios a la línea de investigación): (i) los desarrollos teóricos son punto de partida de los problemas que se abordan y (ii) la aplicación de la metodología teórica de índole general a la columna corresponde a una segunda parte del artículo antes citado y es una de las contribuciones de esta tesis.

2.3.1 Noción general de un estimador

El modelo de proceso no lineal en general se describe por la representación de espacio de estado de la forma:

$$\dot{x} = f(x, u, p), \quad x(0) = x_0 \quad \dim x = n \quad (2.11)$$

$$y = h(x, p) \quad \dim y = m \quad (2.12)$$

Donde x denota al vector de estados, que toma valores del conjunto X de dimensión n , u denota al vector de entradas conocidas al sistema, y y es el vector de salidas medidas, que toma valores del conjunto Y de dimensión m .

Dado el modelo anterior con fines de control o monitoreo, podemos decir de manera general que necesitamos conocer $x(t)$, aunque en la práctica solamente se tiene acceso a y y u . El problema de estimación puede formularse de la siguiente manera: "Dado un sistema (descrito por la ecuaciones 2.11 y 2.12), encontrar un estimado $\hat{x}(t)$ para todo $x(t)$ a partir del conocimiento de $u(\tau)$, $y(\tau)$ para $0 \leq \tau \leq t$ ". Claramente este problema se formula en el sentido que no se pueda invertir a la funcionalidad de las mediciones h con respecto a los estados x en cualquier tiempo τ .

Para resolver el problema de estimación se usa la idea de una retroalimentación de información con las mediciones sobre el modelo que describe al proceso (van der Heijden y col., 2004; Besançon, 2007). Esto no requiere del conocimiento de las

condiciones iniciales. Se puede obtener un estimado de $x(t)$ mediante la integración del sistema (ecuación 2.11) a partir de una condición aproximada de $x(0)$, y la idea de retroalimentar la información por parte de las mediciones. Un estimado $\hat{x}(t)$ de $x(t)$ se puede obtener con la corrección en línea del error medido $h[\hat{x}(t)] - y(t)$ y teniendo errores en las condiciones iniciales $\hat{x}(0)$ con la siguiente expresión:

$$\dot{\hat{x}}(t) = f[\hat{x}(t), u(t), p] + K [h(\hat{x}(t), p) - y(t)], \quad \dot{y}(t) = h(\hat{x}(t), p), \quad \hat{x}_0 = \hat{x}(0) \quad (2.13)$$

Donde el arreglo K corresponde a la ganancia del estimador y su construcción depende del tipo de estimador (es decir por ejemplo observador de Luenberger, filtro extendido de Kalman, estimador geométrico, etc.). El término $h(\hat{x}(t), p) - y(t)$ se denomina **innovación** y es la parte del estimador que transmite la información de las mediciones al sistema. El término $K [h(\hat{x}(t), p) - y(t)]$ es llamado **término de corrección** y corresponde a la parte de compensación del estimador. De acuerdo al diseño y sintonía de K , el estimador tendrá cierto desempeño ante el **error de estimación** que se define como $\hat{x}(t) - x(t)$. Los algoritmos de estimación se pueden describir como métodos de predicción - corrección. El estimador que se muestra en la ecuación 2.13 está formado por una primera parte ($f[\hat{x}(t), u(t), p]$) que corresponde al modelo, es la representación de la planta y se encarga de la tarea predictiva. Esta tarea no es perfecta y necesita de la parte correctiva que corresponde al término de corrección $K [h(\hat{x}(t), p) - y(t)]$, inyectando información real del proceso al modelo de estimación.

Cuando los estados estimados convergen a los reales con las siguientes características (Sontag, 1998):

(i) $\hat{x}(0) = x(0) \Rightarrow \hat{x}(t) = x(t), \quad [\forall t \geq 0];$

(ii) $\| \hat{x}(t) - x(t) \| \rightarrow 0$ para $t \rightarrow \infty;$

Entonces tenemos que:

Sí (i) se cumple para cualquier $x(0)$, $\hat{x}(0)$, es sistema es globalmente *observable*.

Sí (ii) se cumple con una convergencia exponencial, el estimador es exponencial

Si (ii) se cumple existiendo una ganancia que permita una velocidad de convergencia rápida, el estimador puede ser sintonizado.

Sí (ii) se cumple para el sistema, aunque no todos los estados puedan ser reconstruidos por las mediciones, el sistema es *detectable*.

El último punto corresponde a la noción de *detectabilidad*. En este caso la velocidad de convergencia de algunos estados no puede ser sintonizada. Los tres primeros casos corresponden a la noción de *observabilidad*.

2.3.2 Estimador geométrico original (EGO)

En términos generales, el problema de diseño del estimador consiste en inferir en línea los estados x del proceso en base a un modelo (ecuación 2.9), las entradas (u) y salidas medidas (y). Para plantear el problema de diseño del estimador geométrico original, (i) recurrimos a la definición de estructura de modelo de *estimación* [López y Álvarez, 2004]:

$$\sigma = (\kappa, x_i - x_v): \kappa = (\kappa_1, \dots, \kappa_m)', \quad \kappa_i > 1, \quad \kappa_1 + \dots + \kappa_m = \kappa_i \leq n, \quad (x_i', x_v')' = I_x x \quad (2.14)$$

donde κ es el *vector de ordenes de estimación*, κ_i es el orden de estimación (global), κ_i es el orden de *estimación de la i-ésima salida*, x_i (o x_v) son los estados *innovados* (o *no innovados*), $x_i - x_v$ es la partición de estados, y I_x es una matriz identidad de permutación de columnas, (ii) consideramos al modelo (ecuación 2.9) como σ -detectable (Álvarez y Fernández, 2009), y (iii) se escribe el correspondiente *estimador geométrico original* [Álvarez, 2000; López y Álvarez, 2004]:

$$\dot{\hat{x}}_i = f_i(\hat{x}, \Delta_u \hat{v}) + \Omega^{-1}(\hat{x}, \hat{v}) \{I_i + K_y [y - h(\hat{x})]\}, \quad \dot{\hat{x}}_v = f_v(\hat{x}, \Delta_u \hat{v}), \quad \hat{x}(0) = \hat{x}_0 \quad (2.15)$$

$$\dot{z} = K_i[y - h(\hat{x})], \dim(z, \hat{v}) = (m, n_u), \dot{\hat{v}} = \Gamma_u \hat{v} + K_u(u - \Delta_u \hat{v}), z(0) = z_0, \hat{v}(0) = \hat{v}_0 \quad (2.16)$$

donde \hat{x}_i (o \hat{x}_v) son los estados estimados *innovados* (o *no innovados*), z es una estado de acción integral, \hat{v} es el estimado del vector aumentado de entradas [(\cdot)⁽ⁱ⁾ es la i-ésima derivada (\cdot)]

$$v = [u_1, \dots, u_1^{(v_1-1)}; \dots; u_p, \dots, u_p^{(v_p-1)}], \quad v_i \leq \kappa_i - 1 \quad (2.17)$$

Π , Γ_u y Δ_u son matrices con elementos cero/uno, las *matrices de ganancia* K_y , K_i y K_u son obtenidas por asignación de polos de acuerdo a las *dinámicas del error de estimación* preestablecida lineal, no interactiva y de polo asignable (LNPA):

$$\Pi = bd[\pi_1, \dots, \pi_m], \quad \pi_i = (0, \dots, 0, 1), \quad \dim \pi_i = \kappa_i$$

$$\Gamma_u = bd[\Gamma_1^u, \dots, \Gamma_m^u], \dim \Gamma_u = (\kappa_i + m) \times (\kappa_i + m), \Gamma_i^u = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix}, \dim \Gamma_i^u = (\kappa_i + 1) \times (\kappa_i + 1)$$

$$\Delta_u = bd[\delta_1^u, \dots, \delta_m^u], \quad \dim \Delta_u = n \times p, \quad \delta_i^u = (1, 0, \dots, 0), \quad \dim \delta_i^u = 1 \times n_i$$

$$K_y = bd[k_1, \dots, k_m], \quad k_i = (a_1^i \omega_i, \dots, a_{\kappa_i}^i \omega_i^{\kappa_i})', \quad p_i = \{a_1^i, \dots, a_{\kappa_i}^i\}, \quad \omega = (\omega_1, \dots, \omega_m)$$

$$K_i = \text{diag}(\omega_1^{\kappa_i+1}, \dots, \omega_m^{\kappa_i+1})$$

$$K_u = bd[k_1^u, \dots, k_m^u], \quad k_i^u = (b_1^i v_i^u, \dots, b_{n_i}^i v_i^{n_i})', \quad q_i = \{b_1^i, \dots, b_{n_i}^i\}$$

Ω es la matriz de estimación no lineal, calculada con las derivadas direccionales:

$$\Omega(x, v) = \partial_x \phi(x, v), \quad \phi = (\phi_1', \dots, \phi_m')', \quad \phi_i = (h_i, \dots, L_f^{\kappa_i-1} h_i)' \quad (2.18)$$

donde $L_f^i h(x)$ es la i-ésima derivada direccional recursiva de Lie del campo escalar variante en tiempo h a lo largo del campo vectorial f y se define:

$$L_f^{j+1}h = L_f(L_f^j h), \quad L_f h = \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial t}, \quad L_f^0 h = h \quad (2.19)$$

K_y , K_i y K_u se fijan de acuerdo a la dinámica del error preestablecido lineal, no interactivo y de polo asignable:

$$[\mathcal{L}_i(p_i, \omega)] \tilde{y}_i := \tilde{y}_i^{(K_i+1)} + (a_1^i \omega) \tilde{y}_i^{(K_i)} + \dots + (a_{K_i}^i \omega^{K_i}) \tilde{y}_i^{(2)} + \omega_i^{K_i+1} \tilde{y}_i = 0, \quad 1 \leq i \leq m \quad (2.20)$$

$$[\mathcal{M}_i(q_i, \varpi)] \tilde{u}_i := \tilde{u}_i^{(K_i+1)} + (b_1^i \varpi) \tilde{u}_i^{(K_i)} + \dots + (b_{K_i}^i \varpi^{K_i}) \tilde{u}_i^{(2)} + \varpi_i^{K_i+1} \tilde{u}_i = 0, \quad 1 \leq i \leq n_v \quad (2.21)$$

donde p y q (o ω y ϖ) son la configuración de los polos (o del vector de las frecuencia de las ganancias) y \mathcal{L}_i (o \mathcal{M}_i) son operadores diferenciales lineales. La configuración de los polos se obtienen con una forma estándar como pueden ser ITAE, binomial, Butterworth, y así sucesivamente [Dazzo y col., 2003], o una forma hecha a la medida [Fernández, 1996; Álvarez y López, 1999; Álvarez, 2000]. El estimador geométrico original EGO (ecuaciones 2.15 y 2.16) converge robustamente si la dinámica preestablecida del error de salida (2.20) es suficientemente más rápida que la dinámica dominante del proceso (típicamente de 5 a 10 veces). Las principales ventajas de estimador geométrico descrito anteriormente (ecuaciones 2.15 y 2.16) son sus criterios de convergencia, que aplica a sistemas detectables, tiene una estructura ajustable de asimilación de datos y que tiene una metodología de sintonía muy fácil de aplicar. La principal desventaja para su aplicación a sistemas de alto orden es que su implementación requiere del cálculo de las derivadas de Lie (ecuación 2.19), las cuales pueden ser muy complicadas o inmanejables para las sistemas de muy alto orden, como órdenes mayores de tres para las columnas de destilación en particular (Tronci y col., 2005; Venkateswarlu y Kumar, 2006; Pulis, 2007) y órdenes mayores de cinco en sistemas de alto orden en general (Röbenack, 2005 y 2007).

2.3.3 Estimador geométrico rediseñado (EG)

La búsqueda de la estructura debe ser realizada sobre un número absolutamente grande de estructuras posibles, y no sólo se debe restringir la aplicación del estimador a sistemas de bajo orden. Recientemente se ha removido el obstáculo de aplicabilidad del estimador geométrico debido a las derivadas de Lie en el estimador (Álvarez y Fernández, 2009), remplazando la matriz de estimabilidad no lineal Ω (ecuación 2.18) por la matriz de estimabilidad de la aproximación lineal O variante en tiempo.

Puesto que las dinámicas del error de salida (ecuación 2.20) del estimador geométrico original (ecuación 2.15) se sintonizan más rápido que la dinámica del sistema (10 a 15 veces), una buena aproximación O de la matriz de estimabilidad de un sistema no lineal Ω (ecuación 2.18), puede ser obtenida de acuerdo a la teoría de perturbación singular (TPS) [Khalil, 2002], en que el modelo entrada-estado $u-x$ y el error de estimación en los estados no innovados x_v están en régimen de variación lenta (RVL) con respecto a la dinámica rápida del error de estimación de los estados innovados x_r . Lo que nos lleva a que el error de la aproximación es:

$$\tilde{\Omega}(\hat{x}, u) = \Omega(\hat{x}, u) - O(\hat{x}, u) \quad (2.22)$$

$\tilde{\Omega}(\hat{x}, u)$ se convierte en una matriz singular alrededor de un estado estacionario, por lo que su matriz inversa no está definida. Con algebra de matrices tenemos que:

$$\Omega^{-1}(\hat{x}, u) = O^{-1}(\hat{x}, u) - \Omega^{-1}(\hat{x}, u) \tilde{\Omega}(\hat{x}, u) O^{-1}(\hat{x}, u) \quad (2.23)$$

y esto último significa que la dinámica rápida de los estados innovados de la desviación del sistema (ecuación 2.22) se puede aproximar con:

$$O(\hat{x}, u) = [O_1'(\hat{x}, u), \dots, O_m'(\hat{x}, u)]', \quad O_i'(\hat{x}, u) = [a_i(\hat{x}), \dots, a_i(\hat{x}) \mathcal{A}^{r_i-1}(\hat{x}, u)] \quad (2.24)$$

$$a_i(\hat{x}) = \partial h_i / \partial x_i, \quad \mathcal{A}(\hat{x}, u) = \partial f_i / \partial x_i, \quad O(\hat{x}, u) \approx \Omega(\hat{x}, u) \quad (2.25)$$

Tomando el estimador geométrico original (ecuaciones 2.15 y 2.16), sustituyendo la matriz Ω (ecuación 2.18) con la aproximación O (ecuación 2.24) y considerando que las entradas u al sistema son constantes (la acción integral corrige los errores de esta aproximación), obtenemos el **estimador geométrico rediseñado**, que a partir de este punto será llamado simplemente **estimador geométrico (EG)** [Álvarez y Fernández, 2009]:

$$\dot{\hat{x}}_i = f_i(\hat{x}) + O^{-1}(\hat{x})\{II\dot{l} + K_y[y - h(\hat{x})]\}, \quad \dot{\hat{x}}_v = f_v(\hat{x}), \quad \hat{x}(0) = \hat{x}_0 \quad (2.26)$$

$$\dot{l} = K_l[y - h(\hat{x})], \quad \dim l = m, \quad l(0) = l_0 \quad (2.27)$$

Donde O está definida por la ecuación 2.24.

El estimado geométrico EG (ecuación 2.26) con la aproximación O (ecuación 2.24) es considerablemente más simple que el estimador geométrico original EGO (ecuación 2.15), porque mientras la matriz de estimación Ω (ecuación 2.18) en el EGO requiere primero del cálculo de las derivadas de Lie (ecuación 2.19) y después de su jacobiano, el EG sólo necesita del cálculo de los jacobianos $\partial h_i/\partial x_i$ y $\partial f_i/\partial x_i$ del sistema (ecuación 2.25).

Nuestro problema de estimación consiste en verificar con simulación y experimentación si el estimador geométrico rediseñado es correcto y aplicable a la estimación de composiciones en una columna de destilación binaria.

2.3.4 Estimador geométrico con desacoplamiento en la innovación

Si la matriz O tiene un mal condicionamiento numérico, aunque el modelo original del proceso sea σ -detectable (Álvarez y Fernández, 2009) con una matriz de observabilidad O no singular, el estimador puede exhibir un buen comportamiento asintótico, pero un mal desempeño en la respuesta dinámica. En este caso, el desempeño del estimador puede mejorarse reteniendo sólo los m bloques de

elementos diagonales (D_1, \dots, D_m) de la matriz de estimación O , llevando al estimador geométrico con la innovación desacoplada:

$$\dot{x}_i^j = f_i^j(x) + D_i^{j'}(x, u) \{ \pi_i^j l_i + k_i^j [y_i - h_i(x)] \}, \quad \dim x_i^j = \kappa_i, \quad 1 \leq i \leq m, \quad x_i = (x_i^1, \dots, x_i^{\kappa_i}) \quad (2.28)$$

$$\dot{x}_v = f_v(x), \quad x(0) = x_0 \quad (2.29)$$

$$\dot{l}_i = k_i^j [y_i - h_i(x)], \quad \dim l_i = \kappa_i, \quad l_i(0) = l_{i_0} \quad (2.30)$$

Donde:

$$D_i(x, u) = (c_i^1, \dots, c_i^{\kappa_i} \mathcal{A}_i^{r-1})'_{(x, u)}, \quad \dim D_i = \kappa_i \times \kappa_i, \quad \pi_i^j = (0, 0, \dots, 1)', \quad \dim \pi_i^j = \kappa_i$$

El modelo de estimación ha sido modificado como sigue: cada salida y_i es asignada al estado x_i^j innovado κ_i -dimensional, y los otros estados innovados $(x_i^j, j = 1, \dots, \kappa_i; j \neq i)$ se consideran como entradas conocidas del i -ésimo submodelo.

Por otro lado, otro grado de libertad que se tiene es la posibilidad de escoger los estados robustamente observables (x_i) para el diseño del estimador, y transferir los estados mal condicionados a la dinámica no innovada, junto con los estados no observables. De igual forma se pueden hacer las consideraciones convenientes para reducir el modelo (por ejemplo considerar a los estados no innovados constantes) para eliminar la dependencia de la parte descartada del modelo, sabiendo que la acción integral compensa el efecto de los errores del modelado por el comportamiento de las entradas y salidas. Dependiendo del condicionamiento de O (ecuación 2.24), un esquema de innovación desacoplada puede usarse y la acción integral corregirá los errores de desacoplamiento y truncamientos en el modelo.

2.3.5 Filtro extendido de Kalman (FEK)

En esta sección se reseña la técnica de estimación del filtro extendido de Kalman (FEK) con la finalidad de poder compararlo con el estimador geométrico, ya que el FEK es la técnica de estimación más empleada. Desde una perspectiva del filtro extendido de Kalman, el estado aumentado ι asociado con el rediseño del estimador geométrico (ecuación 2.26 y 2.37) corresponde a un ruido blanco integrado (w) (Álvarez y Fernández, 2009). Para un esquema de estimación con observabilidad completa ($\kappa = n$ y $x = x_\iota$), y considerando el modelo estocástico de la siguiente forma:

$$\dot{x} = f[x, u(t)] + B(x, t)\iota, \quad x(0) = x_o, \quad \dot{\iota} = w(t), \quad \iota(0) = \iota_o, \quad y = h(x) + v(t) \quad (2.31)$$

$$\text{donde: } v(t) \sim N[0, R], \quad w(t) \sim N[0, Q], \quad x_{\iota_o} \sim N[\hat{x}_{\iota_o}, P_{x_{\iota_o}}], \quad \iota_o \sim N[\hat{\iota}_o, P_{\iota_o}]$$

v (o w) es un ruido blanco con media Gaussiana cero asociado a una matriz de intensidad R (o Q), y x_o (o ι_o) es un vector aleatorio con media \hat{x}_{ι_o} (o $\hat{\iota}_o$) y matriz de covariancia del error P_{x_o} (o P_{ι_o}). En notación compacta, el modelo anterior se escribe como sigue:

$$\dot{x}_a = f_a(x_a, t) + B_a(x_a, t)w, \quad x_a(0) = x_{a_o}, \quad y = h_a(x_a) + v \quad (2.32)$$

$$\text{donde: } x_a = (x', \iota)', \quad f_a(x_a, t) = \begin{bmatrix} f(x, u(t)) & B(x, t)\iota \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad B_a = \begin{bmatrix} 0 \\ I \end{bmatrix}, \quad h_a(x_a) = h(x)$$

Asumiendo que la trayectoria del modelo $x_a(t)$ es localmente observable estocásticamente (con respecto a y) y controlable (con respecto a w), en el sentido de la matriz Gramiana (integral) [Gelb, 1974], el correspondiente filtro extendido de Kalman convencional (FEK) está dado por:

$$\dot{\hat{x}}_a = f_a(\hat{x}_a, t) + K_{EKF}[y - h_a(\hat{x}_a)], \quad \hat{x}_a(0) = \hat{x}_{a_o}, \quad K_{EKF} = PH'(\hat{x}_a, t)R^{-1} \quad (2.33)$$

$$\dot{P} = F(\hat{x}_a, t)P + PF'(\hat{x}_a, t) + B_aQB_a' - PH'(\hat{x}_a, t)R^{-1}H(\hat{x}_a, t)P, \quad P(0) = P_o \quad (2.34)$$

$$\text{donde: } F(x_a, t) = \partial_{x_a} f_a(x, t) = \begin{bmatrix} \partial_x f(x, u) & B(x, t) \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad H(x_a, t) = \partial_{x_a} h_a(x_a) = [\partial_x h(x), 0]$$

La sintonización del filtro extendido de Kalman requiere de la selección del conjunto de matrices $\{B, Q, R, P_o\}$, las cuales modelan a la incertidumbre. La selección de $P_o = 0$ (ya que el FEK es robusto con respecto a P_o) y $B = I$, son comúnmente usados en estudios de estimación de procesos químicos con el FEK (Wang y col, 1997). La matriz R puede ser obtenida de mediciones en estado estacionario, pero la selección de la matriz Q es en gran parte heurística y depende en un buen grado de la física de proceso, y tiene un efecto profundo sobre el comportamiento de FEK. Esto último, de hecho es una de las dificultades del diseño del FEK, ya que una mala selección de Q puede llevar a un funcionamiento incorrecto o inclusive el estimador puede divergir (Gelb, 1974). En la sección 3.1.3 se presenta la implementación de esta técnica a la columna de destilación.

Para tener un FEK equivalente al EG (Álvarez y Fernández 2009) se debe implementar el cuarteto de matrices $\{B, R, Q, P_o\}$ del FEK convencional con el siguiente conjunto de matrices:

$$B(x, u) = \Omega^{-1}(x, u)\Pi_y, \quad R = \text{diag}(r_1, \dots, r_m), \quad Q = \text{diag}(q_1, \dots, q_m) \quad (2.35)$$

$$q_i = \omega_i^{2(\kappa_i+1)} r_i, \quad P_o = [\Omega^{-1}(\hat{x}_o, \hat{u}_o)]\Sigma[\Omega^{-1}(\hat{x}_o, \hat{u}_o)]. \quad \blacklozenge \quad (2.36)$$

donde Σ denote la solución de la ecuación matricial estática de Riccati y se calcula de la siguiente expresión:

$$0 = \Gamma\Sigma + \Sigma\Gamma' + \Pi Q \Pi' - \Sigma \Delta' R^{-1} \Delta \Sigma, \quad \dim \Sigma = (n + m) \times m, \quad \kappa_i = n \quad (2.37)$$

y Ω se encuentra definida en la ecuación 2.18 y las matrices Π_y , Π , Γ y Δ se definen como sigue:

$$\Pi_y = bd(\pi_1^y, \dots, \pi_m^y), \quad \pi_i^y = (0, \dots, 0, 1)', \quad \dim \pi_i^y = \kappa_i$$

$$\Pi = bd(\pi_1, \dots, \pi_m), \quad \dim \pi_i = (\kappa_i + m) \times (m), \quad \pi_i = (0, \dots, 0, 1)', \quad \dim \pi_i = \kappa_i + 1$$

$$\Gamma = bd(\Gamma_1, \dots, \Gamma_m), \quad \dim \Gamma = (\kappa_i + m) \times (\kappa_i + m), \quad \Gamma_i = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & \\ \vdots & & & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \end{bmatrix}, \quad \dim \Gamma_i = (\kappa_i + 1) \times (\kappa_i + 1)$$

$$\Delta = bd(\delta_1, \dots, \delta_m), \quad \dim \Delta = (m) \times (\kappa_i + m), \quad \delta_i = (1, 0, \dots, 0), \quad \dim \delta_i = \kappa_i + 1$$

y en el estimador geométrico, las ganancias (K_y , K_i) de las ecuaciones 2.25 y 2.26 deben calcularse con una configuración de asignación de polos \mathcal{P} tipo Butterworth (Gelb, 1974; López, 2000; Dazzo, 2003) y el i -ésimo error ($\hat{\eta}_i - \xi_i$) de la dinámica del error de salida es modelado como un ruido blanco con media cero w_i con intensidad q_i , de acuerdo a las siguientes expresiones:

$$(\hat{y}_i - y_i)^{(k_i + 1)} = \hat{\eta}_i[t; \hat{x}(t)] - \xi_i(t) := w_i(t) \sim N[0, q_i], \quad 1 \leq i \leq m$$

2.3.6 Estimador geométrico estocástico (EGE)

A continuación presentamos, después de dar la equivalencia entre el estimador geométrico y el filtro extendido de Kalman, la posibilidad de valorar la incertidumbre de los estimados. Tomando el caso de una trayectoria estimable con estructura σ (con $\kappa_i < n$) tenemos que el estimador geométrico estocástico (EGE) se define como:

$$\dot{\hat{x}}_i = f_i(\hat{x}, u) + O^i(\hat{x}, u)\{I\bar{n} + K_y[y(t) - h(\hat{x})]\}, \quad \dot{\hat{i}} = K_i[y - h(\hat{x})], \quad \dot{\hat{x}}_v = f_v(\hat{x}, u) \quad (3.38)$$

$$P_i = [O^i(\hat{x}, \hat{u})][\Sigma_y(\omega_y)][O^{i'}(\hat{x}, \hat{u})] \quad (3.39)$$

$$\dot{P}_v = P_v A_v(\hat{x}, u) + A_v'(\hat{x}, u) P_v + B_v(\hat{x}, u) P_i B_v'(\hat{x}, u) + Q_v \quad P_v(0) = P_{v0} \quad (3.40)$$

donde

$$P_i = \mathcal{E}(\hat{x}_i \hat{x}_i'), \quad P_v = \mathcal{E}(\hat{x}_v \hat{x}_v'), \quad A_v(x, u) = \partial_{x_v} f_v(x, u), \quad B_v(x, u) = \partial_x f_v(x, u), \quad w_v(t) \sim N[0, Q_v]$$

\mathcal{E} es el operador de expectación, \hat{x} es la media estimada, $P_{\hat{x}}$ su covariancia del error, y Σ_y es una sub-matriz $n \times n$ de la matriz $(n+m) \times (n+m)$ de covariancia Σ (2.37).

2.4. Formulación del problema de estimación

En este trabajo, el problema de estimación consiste en diseñar de manera conjunta la estructura del estimador y el algoritmo para inferir las composiciones en una columna binaria, buscando la máxima simplicidad y el mejor desempeño en el estimador. En la búsqueda, se determinará la mejor ubicación y número de mediciones adecuados para la tarea de estimación, es decir teniendo en cuenta el objetivo específico de estimación (que puede ser inferir todo el perfil de composiciones o solamente algunas composiciones) y especificaciones cualitativas del desempeño del estimador (comportamientos transitorios, velocidad de convergencia y sesgos asintóticos). Se determinará el grado con el cual la estructura y algoritmo de estimación afectan al funcionamiento de la mejor estructura de un estimador para un objetivo específico de estimación.

Los desarrollos teóricos de propósito general (Álvarez y Fernández, 2009) a verificarse con datos experimentales obtenidos en una columna de destilación binaria son los siguientes: (i) el rediseño del estimador geométrico para eliminar el obstáculo de las derivadas de Lie; (ii) la posibilidad de usar desacoplamientos en los esquemas de estimación; (iii) la equivalencia entre el FEK y el EG; y (iv) la capacidad de calcular la incertidumbre de estimación.

El segundo problema consiste en la determinación de la mejor estructura de estimación con fines de monitoreo y control, en el sentido del desempeño del algoritmo, para un objetivo específico de estimación, incluyendo como grados de libertad: (i) la elección de modelo o parte de él, (ii) el número de mediciones y su ubicación, y (iii) el mecanismo de asimilación y transmisión de la información de las mediciones. En base a las ideas de estimación geométrica con estructura de

estimación ajustable frente a las características por etapas de la columna: (i) se define la estructura de estimación para columnas en términos de *módulos* (conjunto de etapas adyacentes) con y sin innovación y de módulos innovados con medición en la frontera o en el dominio, (ii) se considera la posibilidad de utilizar todo el modelo de la columna o parte de él y (iii) se considera la opción de submodelos y estructuras de innovación descentralizadas. Estos conceptos se plantean en el capítulo 4 de esta tesis.

Prácticamente, la decisión estructural consiste en seleccionar: (i) el modelo de estimación (posiblemente de orden reducido), (ii) la partición del modelo en partes con o sin inyección de información por las mediciones (innovadas ó no innovadas), (iii) el tipo de conexión entre las partes del modelo, es decir cómo se transmitirá la información entre las partes del modelo (descentralizadas, desacopladas en una vía, o acopladas), (iv) el algoritmo de estimación, buscando guías para un procedimiento sistemático de construcción, sintonización y de ajustes estructurales, y (v) el número y la ubicación de mediciones. Los puntos anteriores implican el plantear un modelo, buscar reducir el orden de éste manteniendo la información necesaria para satisfacer el objetivo de estimación, y posteriormente diseñar e implementar un estimador de estados con la máxima simplicidad posible y el mejor desempeño.

La definición del problema de estimación que se aborda en esta tesis es diseñar un procesador dinámico de datos, que en base al par (f, h) de un modelo de orden reducido, con parámetros aproximados (p) , regulado por las la entradas (u) y con las salidas (y) medidas, proporciona un estimado de las concentraciones y/o de las temperaturas en el vector de objetivos (z) , dependiendo del propósito específico de la estimación. De esta manera, se está interesado en la obtención y aplicación de una metodología que considere los aspectos estructurales y del algoritmo del diseño para construir el mejor estimador con la estructura más simple, y que permita la selección de la ubicación y número de mediciones adecuadas a la tarea de estimación. Los estimadores candidatos serán valorados con datos experimentales, teniendo en cuenta consideraciones de funcionamiento contra robustez.

El problema es tratado dentro de un enfoque constructivo, el cual permite explotar las características específicas del sistema por etapas (naturaleza ordenada, fenómenos de convención-difusión y características termodinámicas). En el método constructivo se determina la factibilidad de poder determinar las posibles desviaciones entre los estados estimados y los reales, ya que deben ser consideradas en el proceso de diseño del estimador. Primero, mediante medidas de estimabilidad (singularidad, condicionamiento numérico del sistema, y otras que son definidas en este trabajo en capítulos posteriores) se realizan varios tipos de análisis, utilizando los datos experimentales obtenidos con los diversos equipos de medición. En esta primera etapa se obtienen sugerencias que nos permiten plantear el diseño de unos estimadores candidatos para evaluar. Después se continúa con la construcción e implementación de los estimadores candidatos, y en esta última etapa se evalúa el desempeño para seleccionar al estimador que tenga el mejor funcionamiento.

2.5. Experimentos

Debido a que la validación de los conceptos teóricos de las secciones anteriores de este capítulo es una parte importante de este trabajo, en esta sección se describe la columna experimental de destilación binaria que se usa para validar los esquemas de estimación. Se describen las condiciones de operación de los experimentos realizados, y por último se describen las características del proceso por etapas.

2.5.1. Equipo

La columna de destilación que se empleó en este trabajo, es una columna diseñada en Italia por la compañía Didacta, modelo IC18-DV/92. Es una columna de vidrio pyrex a escala piloto que está diseñada como una unidad multifuncional, ya que cuenta con la posibilidad de integrar varios tipos de módulos para poder operar las diversas situaciones que se presentan en columnas de destilación (Figura 2.2). Al

realizar este estudio se utilizaron los accesorios de destilación continua para mezclas líquidas binarias. El diseño de la columna permite separar mezclas líquidas hasta con una diferencia de 0.5 °C en el punto de ebullición de los componentes puros. El sistema líquido a separar en este trabajo fue una mezcla de metanol y agua. Se montaron las secciones de platos perforados tipo *oldershow* (Figura 2.3).

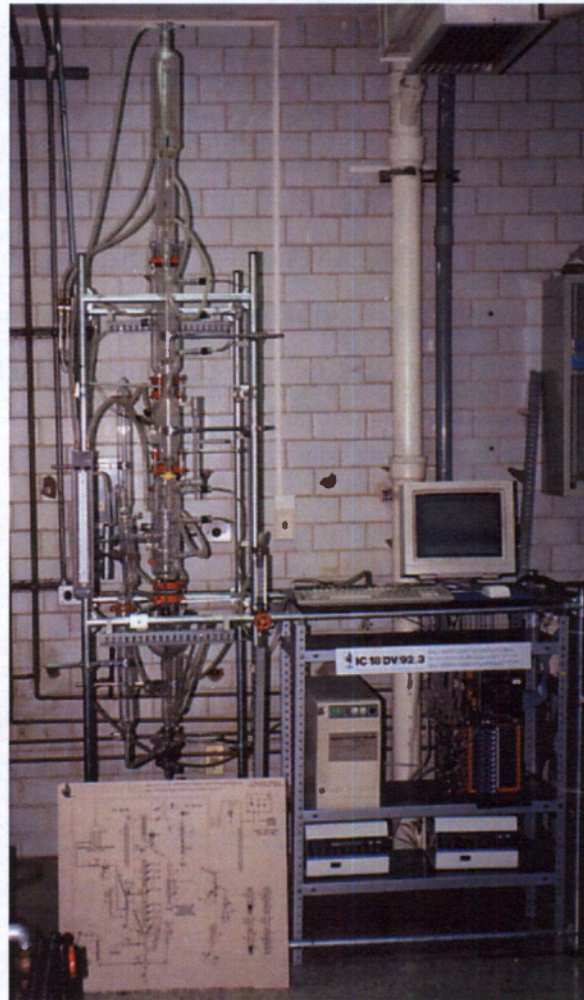


Figura 2.2. Sistema experimental.

El principio de operación de este tipo de plato es muy simple. El plato está formado por una base circular perforada (350 perforaciones de 0.8 mm. por plato) que permite ascender al vapor, entrando éste en contacto con la fase líquida retenida en el plato. Tiene un vertedero con un tubo para el flujo descendente del líquido en el centro del plato, el cual mantiene prácticamente constante el nivel del líquido retenido y asegura

una buena distribución del reflujo. En la operación de la columna, el líquido retenido puede oscilar entre un volumen de 5 a 25 ml. El líquido residual a flujo cero es de aproximadamente 1 ml. El tiempo característico de respuesta en la hidráulica de plato está entre 6 a 12 segundos por plato. Los platos están configurados en dos secciones de cinco etapas cada una, y corresponden a la sección de rectificación y la de agotamiento. El sistema de calentamiento está formado por una resistencia eléctrica en el evaporador con estructura de termosifón donde se hace circular vapor sobrecalentado.

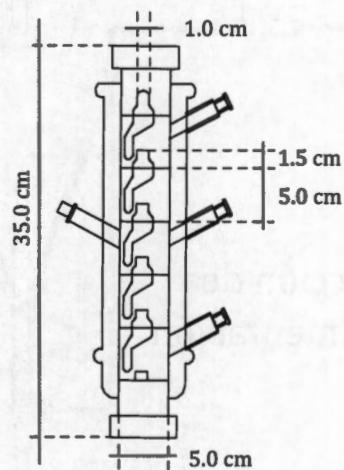
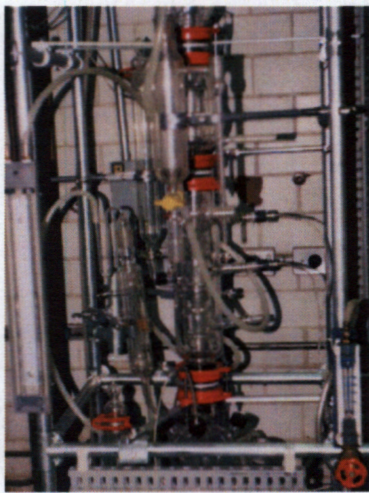


Figura 2.3. Dimensiones de una sección de la columna de destilación experimental, con platos tipo *oldershow*.

La razón de recirculación a través del evaporador con termosifón es alta, en comparación con la razón de sedimentación, es decir la mezcla líquida está perfectamente mezclada mediante convección natural (Figura 2.4). Se utilizó su control electrónico para el suministro requerido de energía. El vapor asciende hacia el condensador total, que no tiene tanque de acumulados. La razón de reflujo es controlado mediante una válvula solenoide, con lo que se logra una relación de destilado/reflujo muy precisa. Los flujos de la alimentación y el producto de fondo son manipulados por medio de bombas peristálticas digitales. La caída de presión entre el evaporador y el condensador es monitoreada por medio de un manómetro diferencial.

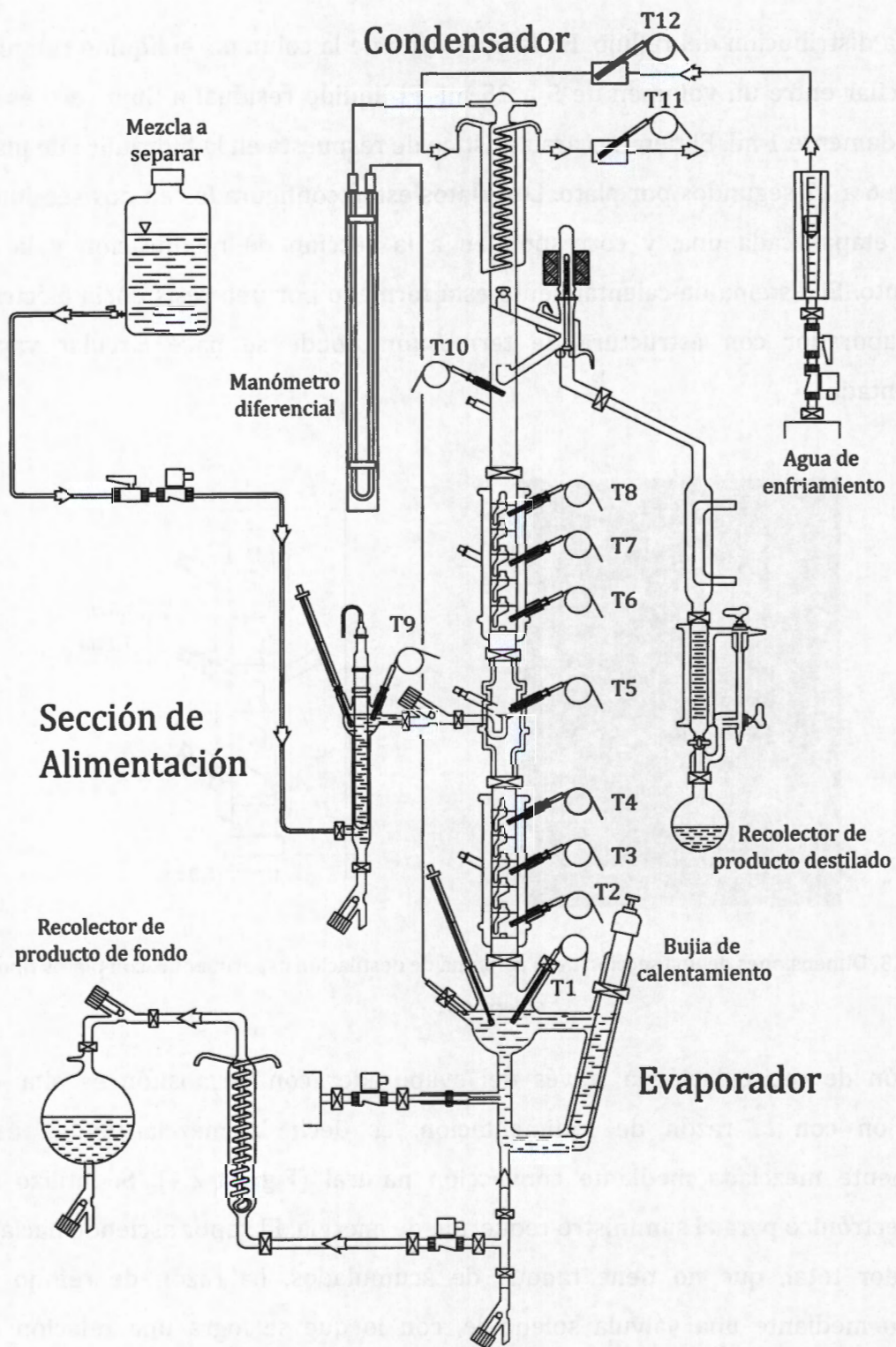


Figura 2.4. Esquema de la columna de destilación experimental.

En una operación a presión atmosférica, la caída de presión es menos de 0.25 cm. de mercurio, por lo que se puede considerar despreciable. La temperatura es medida a lo largo de la columna mediante sistema de lectura de temperaturas con 12 termo resistencias (Figura 2.4).

Se midió la temperatura en los platos 10, 8, 6, 5, 3 y 1 (platos con lugar para colocar un termopar), además de la temperatura de alimentación, del condensador, del evaporador y en los flujos de entrada-salida del agua de enfriamiento en el condensador (Ver Figura 2.4). Una descripción más amplia del equipo y de su respuesta dinámica se presenta en el trabajo de Fernández (1996). La columna está diseñada de tal manera que permite el tomar muestras de líquido en las mismas etapas que se mide la temperatura. En los experimentos se tomó muestra del líquido de las etapas y posteriormente fuera de línea de determino la composición. En el apéndice C se describe el arranque, y operación del proceso de destilación para el sistema experimental.

2.5.2. Corrida experimental

Para determinar el comportamiento dinámico de la columna de destilación descrita en la sección anterior, se monitoreó la evolución de la temperatura en línea y de la composición fuera de línea en varios platos de la columna, en el evaporador y en el condensador, ante cambios en escalón de la composición de alimentación y la relación de reflujo ($r = F_R/F_D$).

En el experimento, el primer cambio que se aplicó fue en la composición de la alimentación. Primero se seleccionaron condiciones iniciales de un estado estacionario de bajo rendimiento (EE1), de tal manera que se pudieran apreciar los cambios debidos a la modificación de la composición de la alimentación. La alimentación saturada fue fijada en un flujo de alimentación $F_A = 40$ ml/min., con una composición molar del componente volátil $c_A = 0.2$ y una temperatura de 57°C. Inicialmente la columna estuvo operando con una baja relación de reflujo ($r = 0.2$) y

una pobre separación ($c_B \approx 0.0$, $c_D \approx 0.57$). El cambio en la composición de alimentación fue del 20 al 40% de composición molar en la mezcla a separar. El efecto producido por el cambio fue monitoreado en ambas secciones de la columna.

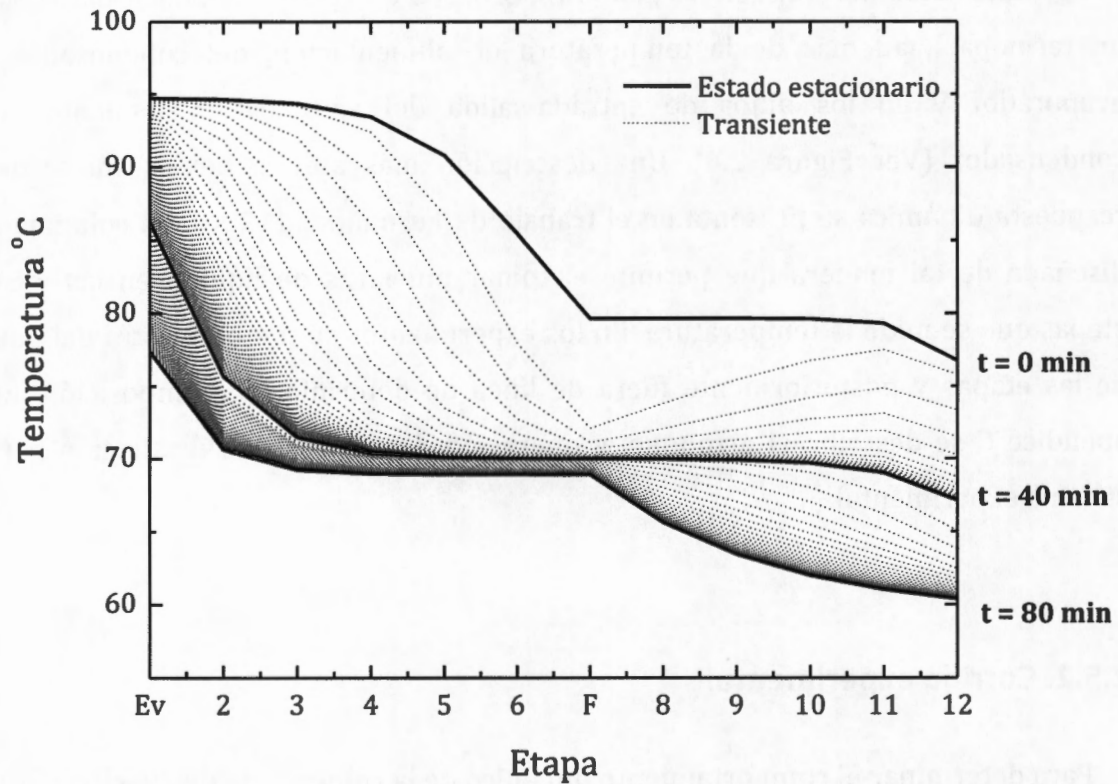


Figura 2.5. Evolución del perfil de temperaturas en la trayectoria experimental.

Aproximadamente en 40 minutos se alcanza el siguiente estado estacionario (EE2) con un grado de separación intermedia ($c_B \approx 0.01$, $c_D \approx 0.79$). Alcanzando el segundo estado estacionario, se procedió a cambiar la relación de reflujo en el control correspondiente, incrementándolo a un valor de 1.5, para finalmente alcanzar el último estado estacionario (EE3) en 40 min. con un mayor grado en la separación de la mezcla de alimentación ($c_B \approx 0.15$, $c_D \approx 0.98$).

Esta trayectoria es una prueba severa donde las temperaturas (Figura 2.5) y composiciones (Figura 2.6) cambian notablemente; eso es con el fin de poder realizar la evaluación de los estimadores candidatos (a obtener en los capítulos siguientes de esta tesis). En el apéndice D se presentan los valores de las condiciones de operación para el sistema experimental.

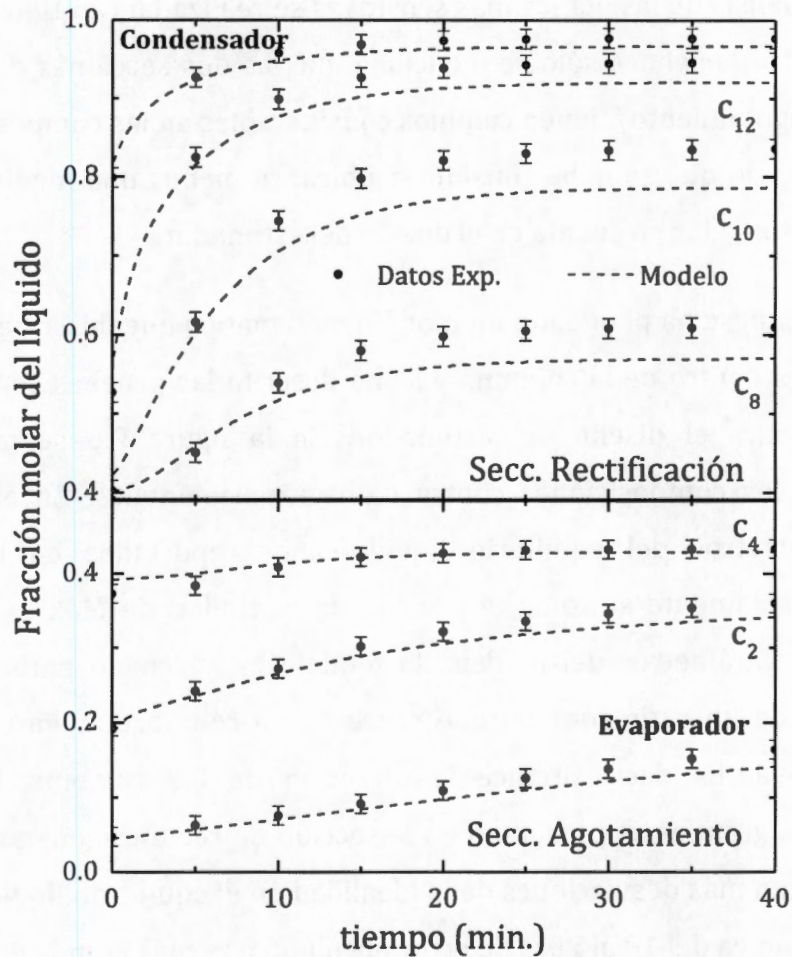


Figura 2.6. Predicciones en la evolución de las composiciones del modelo contra los datos experimentales.

En las figuras 2.5 y 2.6 se puede apreciar que ante cambios en la relación de reflujo, las etapas más sensibles son las de la región de rectificación, y ante cambios en la

composición de la alimentación ambos extremos de la columna sufren cambios igualmente considerables. También se puede observar que el tiempo de repuesta del sistema ante diversos cambios. Así, la dinámica de respuesta más rápida en una etapa dentro de la columna es de aproximadamente 10 minutos, mientras que la más lenta es de un poco más de 40 minutos, y corresponde al evaporador. De igual manera, se observa cuales son las etapas que tiene los cambios mayores en composición y temperatura. Esto último nos permite seleccionar las etapas más sensibles dentro de la columna. El análisis de las etapas más sensitivas se realiza en capítulos posteriores de esta tesis, pero por ahora sólo se menciona que las dos secciones de la columna (rectificación y agotamiento) tienen cambios considerables en las composiciones y las temperaturas, por lo que se debe considerar ubicar al menos una medición en cada sección para ser tomadas en cuenta en el diseño del estimador.

Hasta este punto, se ha planteado un modelo matemático que describe la dinámica de composiciones dentro de la columna y se ha descrito las pruebas experimentales que se usarán para el diseño del estimador. En la figura 2.6 se muestran las predicciones de las composiciones contra datos experimentales. En el modelo se toman los parámetros del equilibrio líquido-vapor reportados en la literatura (Apéndice D) y solamente se toma la presión de la ciudad de México como única corrección a los parámetros del modelo. El modelo es adecuado para los fines de implementación de un estimador porque presenta un comportamiento correcto de manera cualitativa. Es decir predice la dirección de los cambios. Los errores cuantitativos más grandes se presentan en la sección de rectificación, que es la zona donde se presentan más desviaciones de la idealidad en el equilibrio líquido-vapor. El error de predicción va del 10 al 20% de error absoluto, y es más grande en la etapa 10 de la columna. En la sección de agotamiento se presentan errores del 5 al 10%. La etapa que presenta un mayor error en esta sección es el evaporador. El error de composición en el evaporador es ligeramente mayor al del condensador.

2.6 Características de las columnas de destilación

Antes de iniciar la etapa de análisis de la propiedad de estimabilidad en la columna de destilación, es necesario comprender el comportamiento de la operación de la columna (continua o por lotes) y la naturaleza de sistema ordenado que tiene por ser un sistema distribuido. Un sistema distribuido consiste de un conjunto de etapas, módulos o subsistemas que tienen las mismas características y están interconectados entre sí. Cada elemento del conjunto tiene una función específica y esto da como resultado que cada elemento sea independiente de todos los demás elementos del conjunto.

En el caso de la columna de destilación cada elemento corresponde a un plato o etapa. Para comprender la naturaleza ordenada de las etapas de la columna, brevemente explicaremos la importancia que juega la termodinámica de las mezclas líquidas binarias en la columna de destilación en una etapa. Esto último es útil porque cada etapa puede verse como un elemento independiente. Por fines metodológicos, empezaremos describiendo la termodinámica de sistemas binarios (Stichlmair, y Fair, 1998; Petlyuk, 2004) para varios ejemplos. La separación lograda en una destilación se relaciona con la diferencia en la composición de las fases del vapor y del líquido en el equilibrio. La dependencia de los coeficientes de actividad líquido-vapor [$k = \varepsilon(c)/c$] sobre la composición líquida es compleja; por lo tanto las relaciones del equilibrio del líquido-vapor pueden tener características muy diversas.

Para entender el comportamiento de la diferencia de los componentes en la mezcla, dependiendo del grado de la no linealidad causada por la diferencia en propiedades moleculares de los componentes, es mejor usar gráficas de composición de vapor contra composición de líquido [$\varepsilon(c)$ vs. c], temperatura contra composición del líquido [T vs. c], temperatura contra composición del vapor [T vs. $\varepsilon(c)$] y coeficientes de equilibrio contra composiciones de líquido [k_i vs. c] (Figura 2.7). En la figura 2.7, el grado de no linealidad incrementa del esquema a) al h). El esquema a) es una mezcla ideal, el b) es una mezcla no ideal con una inflexión en la curva $\varepsilon(c)$ vs. c . Los

esquemas a) y b) son mezclas *zeotrópicas*, es decir que cualquier composición tiene un punto de ebullición diferente. El esquema c) es una mezcla con un azeótropo tangencial (la curva $\epsilon(c)$ vs. c toca la diagonal en el punto $c = 1$), d) es una mezcla azeotrópica con temperatura de ebullición mínima, e) tiene un azeótropo de punto de ebullición máximo, f) es una mezcla con un azeótropo tangencial interno, g) es una mezcla con dos azeótropos y h) es una mezcla heteroazeotrópica con dos fases líquidas inmiscibles.

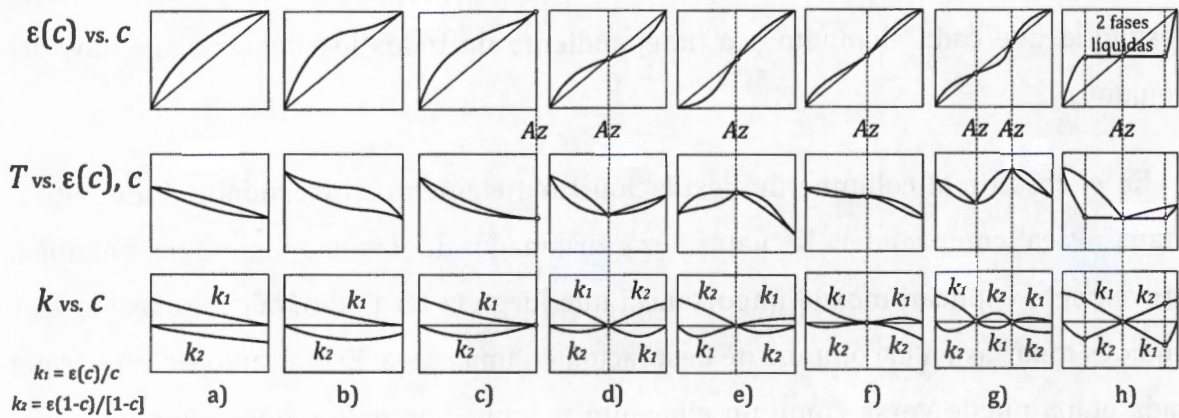


Figura 2.7. Comportamientos en el equilibrio líquido vapor para mezclas binarias: a) ideal, b) no ideal, c) azeótropo tangencial, d) azeótropo de punto de ebullición mínima, e) azeótropo de punto de ebullición máximo, f) azeótropo tangencial interno, g) dos azeótropos y h) heteroazeótropo.

En un azeótropo la composición del líquido es igual que la composición del vapor en la mezcla, por lo cual todos los valores de los coeficientes del equilibrio líquido-vapor son iguales a uno [$k_i = 1$]. Las características discutidas previamente son de gran importancia en la operación de una columna, porque todas ellas nos dan idea de las limitaciones en el proceso de destilación. La presencia de azeótropos hace que la separación sea imposible en la mezcla para llegar a los componentes puros sin la aplicación de algún procedimiento especial. El incremento en la no idealidad hace difícil la separación de las mezclas. Un azeótropo tangencial (la curva $\epsilon(c)$ vs. c toca la diagonal en el punto $c = 0$ ó $c = 1$) no es un obstáculo para la separación; sin embargo, veremos que para $c = 1$ es prácticamente imposible conseguir el componente volátil

con alto grado de pureza, y para $c = 0$ lo es para el componente menos volátil. En la figura 2.7 también se presenta de manera general el comportamiento de la temperatura contra composición en sistemas binarios. Si tenemos una mezcla con una composición baja en el componente volátil para los casos a), b) y c), se tienen pendientes más pronunciadas que implican una relación del cambio de temperatura con respecto al cambio de composición ($\Delta T/\Delta c \approx dT/dc$) con un valor grande. Conforme sea mayor el valor de la composición, el valor de $\Delta T/\Delta c$ será más pequeño. En los primeros tres casos de la figura 2.7 sólo existe una zona de operación en la destilación, y del caso d) en adelante presentan varias zonas (Stichlmair, y Fair, 1998). En la operación de una columna de destilación convencional no se puede pasar de una zona de destilación a otra. En los casos c), d) y f) podemos observar que hay zonas donde la temperatura no tiene cambios y la composición cambia de manera significativa. En estos puntos el valor de $\Delta T/\Delta c$ será muy pequeño o cercano a cero. Los casos g) y h) son aún más complicados por que presenta varios puntos donde el valor de $\Delta T/\Delta c$ es cero. En los casos donde el valor de $\Delta T/\Delta c$ es grande, podemos decir que los cambios de temperatura dará buena información sobre el cambio de composición. En los casos donde el valor de $\Delta T/\Delta c$ es cero, habrá zonas donde los cambios en la composición no se verán reflejados en la temperatura. Los diagramas termodinámicos nos darán claro indicios sobre qué zonas serán ricas en información para inferir composiciones a partir de temperaturas. Estos conceptos nos permiten entender cómo afecta la termodinámica a la ubicación de mediciones de temperatura en la columna de destilación. El caso c) de la figura 2.7 corresponde al tipo de mezcla binaria que se uso en la experimentación descrita en la sección 2.5 de esta tesis. Esta mezcla ofrece las características de no linealidad de cualquiera de los posibles comportamientos en el equilibrio líquido vapor descritos antes (Figura 2.7).

2.7 Resumen

Hasta este punto se ha presentado la metodología de estimación geométrica no lineal de propósito general (que ofrece a la estructura como grado de libertad en el diseño, pero no dice cómo elegir la mejor estructura) y se ha planteado el problema de resolver de manera conjunta el diseño del modelo y estimador, para inferir composiciones en una columna de destilación binaria a partir de mediciones de temperatura, buscando la máxima simplicidad y el mejor desempeño en un estimador. Se describe el modelo matemático de la columna de destilación binaria y las trayectorias experimentales para validar los esquemas de estimación que se proponen en los siguientes capítulos. De igual forma se mencionan aspectos importantes de la física del problema que son relevantes en el diseño del estimador: aspectos hidráulicos, termodinámicos y la naturaleza por etapas del caso de estudio.

Se plantea explotar las características del sistema por etapas y los grados de libertad en el diseño que ofrece el estimador geométrico, como lo es la posibilidad de escoger los estados robustamente observables (x_r) para el diseño del estimador, y transferir los estados mal condicionados a la dinámica no innovada, junto con los estados no observables. De igual forma se menciona las posibilidades convenientes para reducir el orden del modelo de estimación, sabiendo que la acción integral del estimador geométrico compensa el efecto de los errores. Esta tesis tiene la finalidad de: (i) validar experimentalmente la versión rediseñada del estimador geométrico de propósito general desarrollado recientemente (Álvarez y Fernández, 2009) con una clase particular de sistema (columna de destilación binaria), y (ii) encontrar la mejor estructura (tipo de modelo, de algoritmo y de innovación) frente a un objetivo específico de estimación y explicar la conexión entre la estructura y el desempeño del estimador, que a la fecha sigue siendo un tema de investigación abierto.

El problema de estimación consiste en la determinación de la mejor estructura de estimación con fines de monitoreo y control, en el sentido del desempeño del algoritmo, para un objetivo específico de estimación, incluyendo como grados de

libertad: (i) la elección de modelo o parte de él, (ii) el número de mediciones y su ubicación, y (iii) el mecanismo de asimilación y transmisión de la información de las mediciones. En base a las ideas de *estimación geométrica* con estructura de estimación ajustable frente a las características por etapas de la columna: (i) se define la estructura de estimación para columnas en términos de *módulos* (conjunto de etapas adyacentes) con y sin innovación y de módulos innovados con medición en la frontera o en el dominio, (ii) se considera la posibilidad de utilizar todo el modelo de la columna o parte de él y (iii) se considera la opción de submodelos y estructuras de innovación descentralizadas. Los puntos anteriores implican el plantear un modelo, buscar reducir el orden de éste manteniendo la información necesaria para satisfacer el objetivo de estimación, y posteriormente diseñar e implementar un estimador de estados con la máxima simplicidad posible y el mejor desempeño.

El problema será tratado dentro de un enfoque constructivo, el cual permite explotar las características específicas del sistema por etapas (naturaleza ordenada, fenómenos de convención-difusión y características termodinámicas). Primero, mediante medidas de estimabilidad (singularidad, condicionamiento numérico del sistema, y otras que son definidas en este trabajo en capítulos posteriores) se realizan varios tipos de análisis, utilizando los datos experimentales obtenidos con los diversos equipos de medición. En esta primera etapa se obtienen sugerencias que nos permiten plantear el diseño de unos estimadores candidatos para evaluar. Después se continúa con la construcción e implementación de los estimadores candidatos, y en esta última etapa se evalúa el desempeño para seleccionar al estimador que tenga el mejor funcionamiento.

3. VERIFICACION DEL ESTIMADOR GEOMETRICO REDISEÑADO

Este capítulo tiene tres objetivos: (i) se verifica la metodología de la estimación geométrica de propósito general con la clase de columnas de destilación binaria, como caso representativo de un problema difícil para estimadores del tipo Luenberger, (ii) se aplica la metodología a la columna de destilación binaria experimental descrita en el capítulo dos, abordando los rubros de construcción, sintonización, grado de libertad estructural y verificación; y (iii) generar el punto de partida para estudio del problema del diseño de la estructura que lleve al mejor desempeño en un estimador, en relación a un objetivo específico de estimación.

Específicamente, en el este capítulo se verifica experimentalmente: (i) el rediseño para remover obstáculo de aplicabilidad del estimador geométrico, (ii) la conexión con el filtro extendido de Kalman y (iii) la capacidad de estimación de la incertidumbre en los estimados de composición. Se inicia planteando los métodos de estimación que se utilizan en esta tesis (estimador geométrico, filtro extendido de Kalman y el estimador geométrico estocástico) aplicados a la columna de destilación. Se explotan las características termodinámicas y la naturaleza de proceso por etapas de la columna de destilación binaria.

3.1 Técnicas de estimación no lineal en la columna

Como punto de partida tenemos que para un proceso dado, el estimador geométrico rediseñado tiene: (i) una construcción simple en base a Jacobianos del modelo, (ii) un criterio robusto no local de convergencia acoplado con guías de sintonización convencional, (iii) la estructura de estimación del modelo se puede tomar como grado de libertad para el diseño del estimador, y (iv) la opción de estimación de la incertidumbre.

Así, dado un modelo del proceso de destilación como punto de partida (típicamente detallado), el diseñador debe escoger el modelo de estimación (ecuación 2.17) para inferir a los estado de interés x a partir de las mediciones de las entradas y salidas del proceso (u, y) . La técnica de estimación geométrica rediseñada ofrece los medios para calcular las medidas de detectabilidad del estimador geométrico original (López y Álvarez, 2004) fácilmente, y esto abre la oportunidad a su vez para la valoración y comparación de estructuras candidatas de las estructura de estimación, y el desarrollo de búsquedas sistemáticas de las mejores estructuras

Como se ha mencionado en la introducción y en el planteamiento del problema, una de las contribuciones de esta tesis corresponde a la parte de aplicación del trabajo de Álvarez y Fernández (2009). Dicho trabajo contiene desarrollos teóricos de índole general que pueden ser aplicados a procesos no lineales en general, desarrollos tales como el rediseño del estimador geométrico para ser aplicado a sistemas de alta dimensionalidad, la conexión con el filtro extendido de Kalman y la versión estocástica que permite la estimación de la incertidumbre. Para los efectos de esta tesis, son un punto de partida y se aplican a la columna de destilación en este capítulo.

En esta sección se plantea el problema de validar el desarrollo teórico mostrado en el capítulo anterior con una columna de destilación binaria y con datos experimentales, en el entendido de que (aunque complementarios a la línea de investigación): (i) los desarrollos teóricos son punto de partida de los problemas

abordados en esta tesis y (ii) la aplicación de la metodología teórica de índole general a la columna corresponde a la segunda parte del trabajo de Álvarez y Fernández (2009) y es una de las contribuciones de esta tesis.

Los desarrollos teóricos de índole general a verificarse con la columna de destilación son los siguientes: (i) rediseño para eliminar el obstáculo de las derivadas de Lie, siendo importante mencionar que se rediseña garantizando condiciones de convergencia robusta, manteniendo un esquema de sintonía fácil y con la posibilidad de tomar el modelo y el algoritmo como grado de libertad; (ii) equivalencia entre el filtro extendido de Kalman (EKF) y el estimador geométrico (GE), y (iii) la capacidad de estimar la incertidumbre en línea.

3.1.1 Estimador geométrico original

En términos generales, el problema de diseño de un estimador para la columna de destilación consiste en inferir en línea las composiciones del componente volátil (ecuaciones 2.5 y 2.6) en base al modelo de estimación (ecuaciones 2.11 y 2.12), las entradas (u) y salidas medidas (y) del proceso. El estimador geométrico original (Álvarez y López 1999; Álvarez, 2000) descrito de manera general en el capítulo anterior, aplicado a la columna de destilación para inferir las composiciones definidas en una estructura σ a partir de mediciones de temperatura, y con el conocimiento de las entradas, está dado como sigue:

$$\dot{\hat{c}}_i = f_i(\hat{c}, u, p) + \Omega^{-1}(\hat{c}, u, p) \{ \Pi \hat{l} + K_y [y - h(\hat{c})] \}, \quad \dim \hat{c}_i = \kappa_i \quad z = g(\hat{c}, p) \quad (3.1)$$

$$\dot{\hat{c}}_v = f_v(\hat{c}, u, p), \quad \dim \hat{c}_v = n - \kappa_i \quad (3.2)$$

$$\dot{\hat{l}} = K_l [y - h(\hat{c})], \quad \dim \hat{l} = m, \quad y = (T_1, \dots, T_m), \quad h(\hat{c}) = (\beta_1(\hat{c}), \dots, \beta_m(\hat{c}))' \quad (3.3)$$

$$\sigma = (\kappa, c_i - c_v): \quad \kappa = (\kappa_1, \dots, \kappa_m)', \quad \kappa_i > 1, \quad \kappa_1 + \dots + \kappa_m = \kappa_i \leq n, \quad (c_i', c_v')' = I_x C \quad (3.4)$$

Donde \hat{c}_i (o \hat{c}_v) es el vector de estados estimados innovados (o no innovados), z es el vector de estados que define el objetivo de estimación, l es un estado de acción integral, y es el vector de mediciones de temperatura y $\beta(\hat{c})$ es la solución a la expresión de punto de burbuja (apéndice B). Composición innovada es aquella en la que hay el término de corrección $[\Omega^{-1}\{\Pi l + K_y(y - h)\}]$ por parte de las mediciones y . Donde no está presente este término, se llaman composiciones no innovadas. Ω es la matriz de estimación no lineal:

$$\Omega = \partial_c \phi(\hat{c}, u), \quad \phi = (\phi_1', \dots, \phi_m')', \quad \phi_i = (\beta_i(\hat{c}), \dots, L_{f_i}^{\kappa_i-1} \beta_i(\hat{c}))' \quad (3.5)$$

Donde $L_{f_i}^j \beta_i(\hat{c})$ es la j -ésima derivada direccional recursiva de Lie del campo escalar variante en tiempo $\beta_i(\hat{c})$ a lo largo del campo vectorial f_i y se define en la ecuación 2.19. Π es una matriz de elementos cero/uno y K_y (o K_i) es la matriz de ganancia del estimador (o es la matriz de ganancia de la acción integral) y se definen en la sección 2.3.2 del capítulo anterior (ver apéndice F).

3.1.2 Estimador geométrico rediseñado

Tomando el estimador geométrico rediseñado (ecuaciones 2.26 y 2.27) [Álvarez y Fernández, 2009], y aplicándolo a la columna de destilación binaria tenemos:

$$\dot{\hat{c}}_i = f_i(\hat{c}, u, p) + O^{-1}(\hat{c}, u, p) \{\Pi l + K_y[y - h(\hat{c})]\}, \quad \dim \hat{c}_i = \kappa_i \quad z = g(\hat{c}, p) \quad (3.6)$$

$$\dot{\hat{c}}_v = f_v(\hat{c}, u, p), \quad \dim \hat{c}_v = n - \kappa_i, \quad \hat{c}(0) = \hat{c}_o, \quad \hat{c} = [\hat{c}_i', \hat{c}_v']' \quad (3.7)$$

$$l = K_i[y - \beta(\hat{c})], \quad \dim l = m, \quad l(0) = l_o, \quad y = (T_1, \dots, T_m), \quad h(\hat{c}) = (\beta_1(\hat{c}), \dots, \beta_2(\hat{c}))' \quad (3.8)$$

Donde O está definida por:

$$O(\hat{c}, u) = [O_1'(\hat{c}, u), \dots, O_m'(\hat{c}, u)]', \quad O_i'(\hat{c}, u) = [a_i(\hat{c}), \dots, a_i(\hat{c}) \mathcal{A}^{\kappa_i-1}(\hat{c}, u)] \quad (3.9)$$

$$a(\hat{c}) = \partial\beta(\hat{c}_i)/\partial c_i, \quad \mathcal{A}(\hat{c}, u) = \partial f_i/\partial c_i, \quad O(\hat{c}, u) \approx \Omega(\hat{c}, u) \quad (3.10)$$

Reciente se establece la equivalencia entre el filtro extendido de Kalman y el estimador geométrico (Álvarez y Fernández, 2009). De esta equivalencia se obtiene una expresión que permite tener la capacidad de inferencia de la incertidumbre de estimación. El **estimador geométrico estocástico (EGE)** está constituido por las ecuaciones 3.6, 3.7 y 3.8 del estimador geométrico rediseñado más las siguientes expresiones:

$$P_i = [O^{-1}(\hat{c}, u, p) \Sigma_G(\omega) O^{-1'}(\hat{c}, u, p)], \quad P_i = E(\hat{c}_i, \hat{c}_i') \quad (3.11)$$

Donde E es el operador de expectación, P_i es la covariancia del error y Σ_G es la matriz de covariancia que se obtiene mediante la siguiente ecuación matricial de Riccati estática de dimensión $(\kappa_i + m) \times m$:

$$0 = \Gamma \Sigma_G + \Sigma_G \Gamma' + \Pi Q \Pi' - \Sigma_G \Delta' R^{-1} \Delta \Sigma_G \quad (3.12)$$

Donde Q (o R) es la matriz de covariancia del error en el modelo (o es la covariancia del error de las mediciones) y se definen como:

$$R = \text{diag}(r_1, \dots, r_m), \quad Q = \text{diag}(q_1, \dots, q_m), \quad q_i = \omega_i^{2(\kappa_i+1)} r_i \quad (3.13)$$

Donde r_i es la covariancia del error de la medición i y q_i de la covariancia del error del i -ésimo estado. Π , Γ y Δ se definen en la sección 2.3.5 después de la ecuación 2.37.

Una vez eliminado el obstáculo de aplicabilidad del estimador geométrico original, parte de nuestro problema de estimación consiste en: (i) tomar la selección del modelo (f y h) como grado de libertad en el diseño del estimador; (ii) validar la aproximación $O \approx \Omega$ (ecuación 2.23) en la columna de destilación; y (iii) validar la posibilidad de valorar la incertidumbre de la estimación.

3.1.3. Filtro Extendido de Kalman

El *filtro extendido de Kalman (FEKC)* ha llevado a buenos resultados útiles en la operación de columnas de destilación (Baratti y col., 1995, 1998; Oisiovici y Cruz, 2000; Venkateswarlu y Avantika, 2001; Venkateswarlu y Kumar, 2006). La principal dificultad es que el orden del filtro extendido de Kalman es notablemente mayor que el orden del sistema original y prácticamente todos los trabajos que usan al filtro extendido de Kalman lo hacen bajo la consideración de sistema completamente observable. El filtro extendido de kalman (Baratti y col., 1995) para inferir las composiciones en la columna de destilación binaria a partir de mediciones de temperatura, y con el conocimiento de las entradas, se define como sigue:

$$\dot{\hat{c}} = f_c(\hat{c}, u, p) + K_{FEK}(\hat{c}, u, p) [y - h(\hat{c})], \dim \hat{c} = n, \hat{c}(0) = \hat{c}_0, y = (T_1, \dots, T_m) \quad (3.14)$$

$$\dot{P} = A(\hat{c}, u, p) P + P A'(\hat{c}, u, p) + Q - P C'(\hat{c}, p) R^{-1} C(\hat{c}, p) P, \dim P = n(n+1)/2 \quad (3.15)$$

$$K_{FEK}(\hat{c}, u, p) = P C'(\hat{c}, p) R^{-1}, R = \text{diag}(r_1, \dots, r_m), Q = \text{diag}(q_1, \dots, q_m), P(0) = P_0 \quad (3.16)$$

Donde $A = \partial f_c / \partial \hat{c}$ y $C = \partial \beta(\hat{c}) / \partial \hat{c}$. Mientras que la matriz R (o P_0) de la medición (o condición inicial de P) se puede ser obtenida de mediciones en estado estacionario (o de ruido), la selección de la matriz Q es en gran parte heurística y depende a un buen grado de la naturaleza del proceso (Gelb, 1974) y en columnas de destilación se ha diseñado como una matriz diagonal (Baratti y col., 1995), como se muestra en la ecuación 3.16. Para disminuir el orden del filtro extendido de Kalman (Abdel-Jabbar y col., 1998), lo han implementado por secciones o por grupo de platos con un FEK de menor orden para cada medición.

Para tener un FEK equivalente al EG (Álvarez y Fernández 2009), que denotaremos por *FEKG* (ver sección 2.3.5), se debe implementar el cuarteto de matrices $\{B, R, Q, P_0\}$ del FEK convencional con el siguiente conjunto de matrices:

$$B(x, u) = \Omega^{-1}(x, u) \Pi_y, \quad R = \text{diag}(r_1, \dots, r_m), \quad Q = \text{diag}(q_1, \dots, q_m) \quad (2.35)$$

$$q_i = \omega_i^{2(\kappa_i+1)} r_i, \quad P_o = [\Omega^{-1}(\hat{x}_o, \hat{v}_o)] \Sigma [\Omega^{-1}(\hat{x}_o, \hat{v}_o)]. \quad \diamond \quad (2.36)$$

donde Σ denota la solución de la ecuación matricial estática de Riccati y se calcula de la expresión descrita por la ecuación 2.37, al igual que Π_y . Las ganancias del estimador deben calcularse con una configuración de asignación de polos \mathcal{P} tipo Butterworth (ver apéndice G).

3.1.4 Sintonización

De los datos experimentales (sección 2.5.2) y la información del modelo detallado de la columna (sección 2.2), tenemos que:

$$r = 0.25 \text{ C}^2, \quad \lambda_c \approx 1/15 \text{ min}^{-1}, \quad \lambda_\eta \approx 1 \text{ min}^{-1} \quad (3.17)$$

donde r es la media cuadrado del error de la medición, λ_c es la frecuencia dominante de las composiciones en la columna de destilación, y λ_η es la frecuencia característica de la dinámica de líquidos retenidos (no modelados). El intervalo de etapas [1 a 4] (ó [10 a 12]) es el más sensitivo (es decir, con el gradiente de temperatura más grande de etapa a etapa) de la sección de agotamiento (o rectificación), y la ubicación de la medición en la etapa 2 (ó 12) para la sección de agotamiento (o rectificación) representa un buen compromiso entre sensibilidad y cercanía a las composiciones de los efluentes. El estimador geométrico fue fijado con siguiente el esquema de asignación de polos: (i) para una salida y_i con orden par κ_i , los $\kappa_i/2$ pares de polos complejos conjugados con el par factor de amortiguamiento – frecuencia (ecuación 2.20, apéndice G):

$$(\zeta_i, \omega_i) = (\zeta, \omega), \quad 1 \leq i \leq m = 1, 2 \quad \omega = n_\omega \lambda_c \quad (3.18)$$

significando que ω_i es fijado n_ω veces más rápido que la frecuencia natural de la columna de destilación λ_c , y (ii) para un κ_i impar, un polo es fijado al valor real igual a

ω_i , y los demás $(\kappa_i+1)/2$ polos son fijados con sus complejos conjugados obtenidos con el par factor de amortiguamiento – frecuencia.

Para una estructura de estimación dada, los parámetros de sintonía del estimador geométrico original pueden ser aplicados: (i) directamente al estimador geométrico rediseñado, al estimador geométrico estocástico, y (ii) traducidos al filtro extendido de Kalman combinando la fórmula de equivalencia del EG-FEK (ecuaciones 2.35 y 2.36) con el modelo estocástico de Q en la columna, empleado en los estudios anteriores de aplicación de FEK (ecuación 3.16):

$$R = r d(1, \dots, 1), \quad Q = bd(Q_1, \dots, Q_m), \quad Q_i = q_i d(1, \dots, 1), \quad q_i = r \omega^{2(\kappa_i+1)}, \quad \omega = n_{\omega} \lambda_c \quad (3.19)$$

Así, las ecuaciones 3.17, 3.18 y 3.19 constituyen un esquema de sintonización común para comparar ampliamente los desempeños de los diferentes estimadores.

3.2 Estimación basada en modelo completo con innovación en todas las etapas

El primer problema de esta tesis consiste en valorar con datos experimentales la factibilidad (derivada teóricamente) de implementar un *estimador no lineal del tipo Luenberger* sin calcular *derivadas direccionales* (que en caso del sistema experimental empleado en este trabajo son doce y a sabiendas que en la literatura se reporta que no se puede ir más allá de tres). Con el fin de ir comparando el estimador geométrico con el filtro extendido de Kalman, ambos son implementados en las mismas estructuras. En esta sección la estructura se dará sin importar si es la mejor, la búsqueda de la mejor estructura se resuelve en los siguientes capítulos.

3.2.1 Estimación con una medición de temperatura

El caso de modelo completo con innovación de una medición en todas las etapas significa la situación más desfavorable para el estimador geométrico original, en una comparación entre el estimador geométrico y el filtro extendido de Kalman. Esto es por el cómputo de la matriz de estimabilidad Ω de dimensión 12×12 (para el sistema descrito en la sección 2.5) que el estimador geométrico original requiere, es decir la dificultad está en el cálculo de las derivaciones de orden 12 para la derivada de Lie.

El modelo observable con 12 estados es dado por (ecuación 2.9 y 2.10), con la estructura (ecuación 2.14)

$$\sigma = (\kappa, x_i = x), \quad n = 12, \quad x = (c_1, \dots, c_{12})', \quad \kappa_i = 12, \quad y = \beta(c_{10}) \quad (3.20)$$

Con un factor de oscilación de $\zeta = 2^{1/2}$, las guías de sintonía del estimador geométrico nos llevan a obtener un valor $n_\omega = 6$. Mientras que las implementaciones del estimador geométrico rediseñado y el filtro extendido de Kalman fueron realizadas fácilmente, el estimador geométrico original se podría implementar solamente hasta un orden de estimación $\kappa = 3$, después de un procedimiento complicado de derivación usando algún paquete de software comercial basado en matemática simbólica.

El desempeño del estimador geométrico rediseñado (implementado con 13 ecuaciones diferenciales ordinarias) y el filtro extendido de Kalman (implementado con 90) es presentado en las figuras 3.1 y 3.2. El esquema de la derecha de la figura 3.1 representa a las etapas del sistema con una medición y en el capítulo 4 se explica detalladamente. Las figuras mencionadas antes muestran que: (i) básicamente, los dos estimadores exhiben el mismo comportamiento (figura 3.1), (ii) el estimador geométrico tiene los errores más pequeño de estimación (figura 3.2), y (iii) los dos estimadores alcanzan una reducción apreciable del error de estimación (desde un 5 a 20% se reduce hasta un 0.5 a 2.5%).

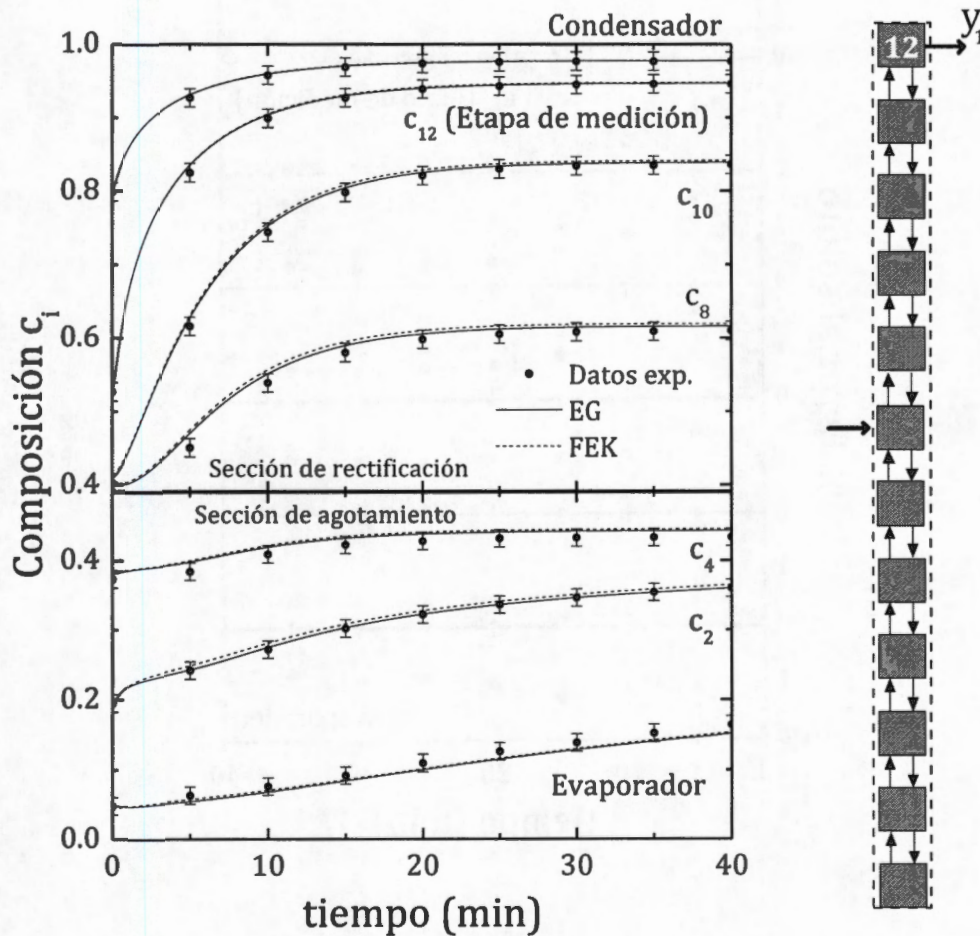


Figura 3.1. Estimación de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico (EG) y el filtro extendido de Kalman convencional (FEK), usando una medición (etapa 12) e innovando en todas las etapas.

Aunque con una medición se logra reducir el error de estimación en el modelo, la estructura de una medición y con innovación en todas las etapas no es robusta ante cambios de operación, errores en los parámetros de operación y en los parámetros de termodinámicos. Sin embargo nos permite mostrar que se ha logrado la implementación del estimador geométrico a un sistema de alto orden.

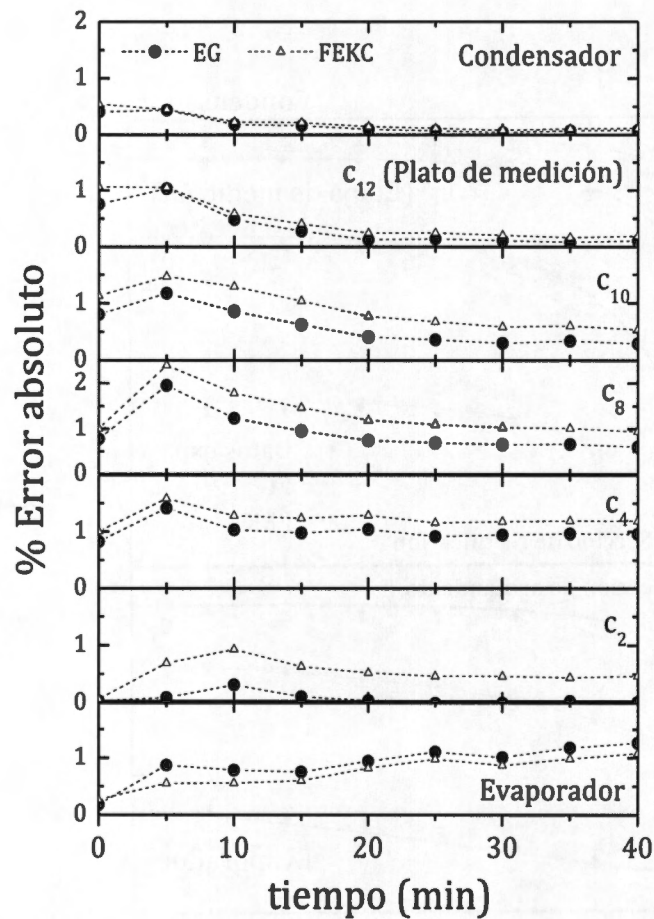


Figura 3.2. Error de estimación para la inferencia de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico (EG) y el filtro extendido de Kalman convencional (FEKC), usando una medición (etapa 12) e innovando en todas las etapas.

3.2.2 Estimación con dos mediciones de temperatura

Continuando con esquemas de estimación con innovación en todas las etapas, consideremos la siguiente estructura de estimación completamente observable con dos mediciones dadas (la selección de las mediciones se verá en el siguiente capítulo):

$$\sigma = (\kappa, x_i = x), \quad n = 12, \quad x_i = (c_1, \dots, c_{12})', \quad \kappa_s = \kappa_e = 6 \quad (3.21)$$

$$y = (\beta(c_2), \beta(c_{10})) \quad (3.22)$$

Para un valor fijo de $\zeta = 2^{1/2}$, las guías de sintonía del estimador nos lleva a un valor de $n_\omega = 6$.

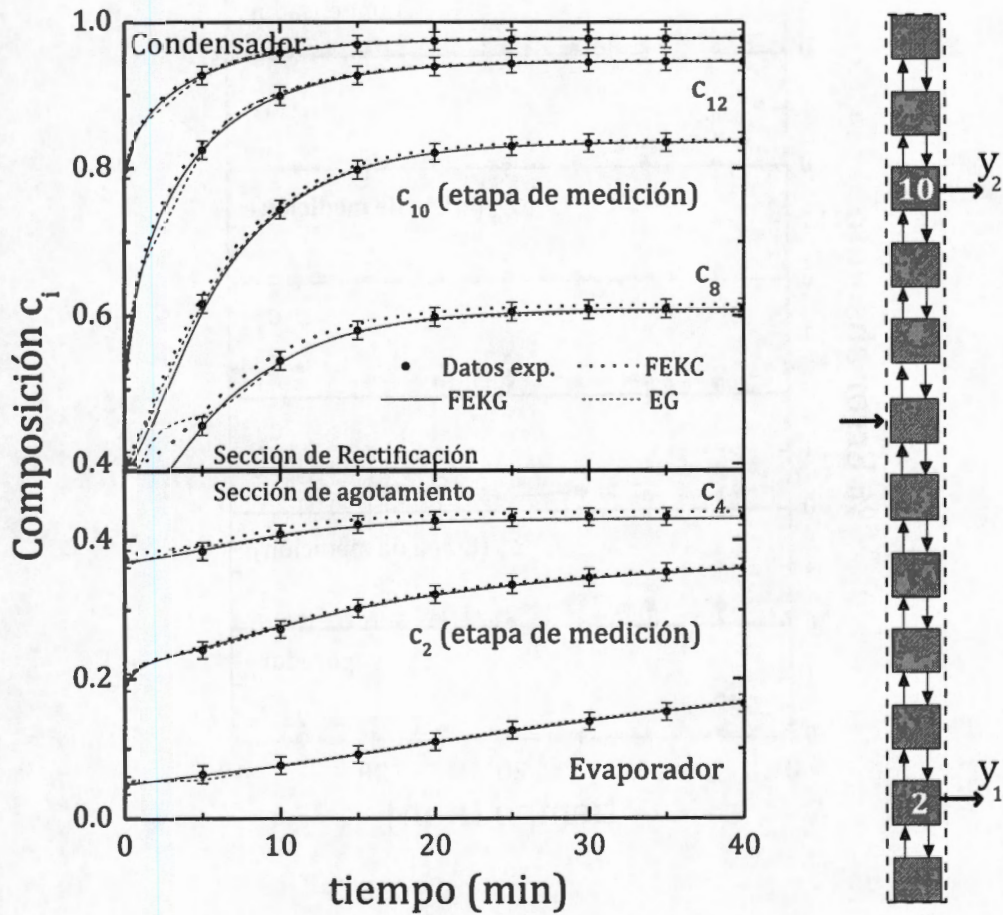


Figura 3.3. Estimación de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico (EG), el filtro extendido de Kalman equivalente al geométrico (FEKG) y el filtro extendido de Kalman convencional (FEKC), usando dos mediciones (etapas 2 y 10) e innovando en todas las etapas.

El comportamiento del estimador geométrico (EG) con 14 ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs), el filtro extendido de Kalman equivalente al geométrico (FEKG, con ecuaciones 2.35 y 2.36) con 92 EDOs, y el filtro extendido de Kalman convencional (FEKC) con 90 EDOs son presentados en figure 3.3.

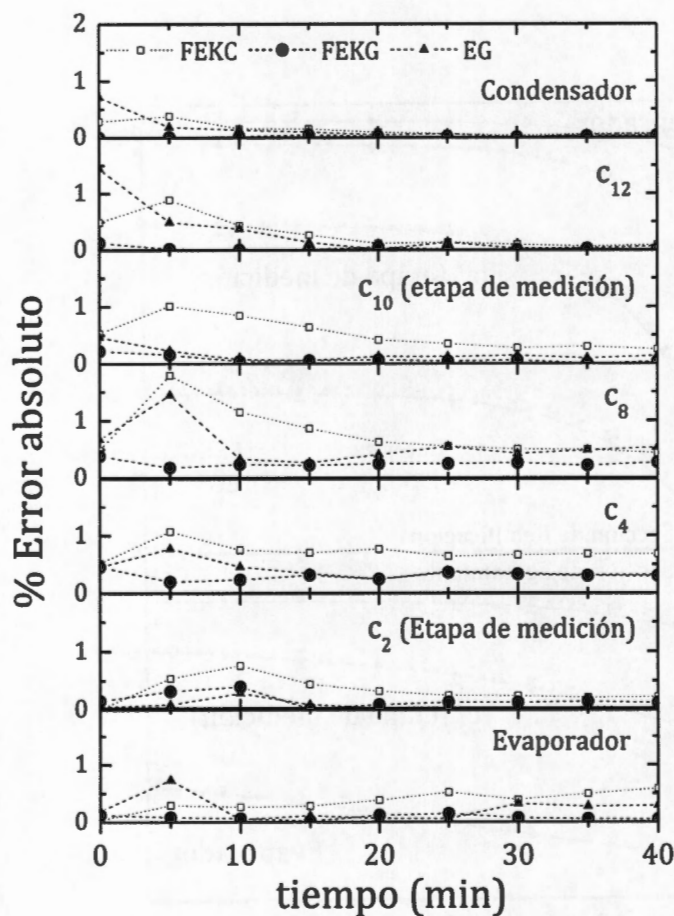


Figura 3.4. Error de estimación para la inferencia de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico (EG), el filtro extendido de Kalman equivalente al geométrico (FEKG) y el filtro extendido de Kalman convencional (FEKC), usando dos mediciones e innovando en todas las etapas.

El esquema de la derecha de la figura 3.3 representa a las etapas del sistema con dos mediciones. Las figuras 3.3 y 3.4 muestran que: (i) los tres estimadores llevan al mismo funcionamiento en general (figura 3.3), verificando la validez de usar un

esquema común de sintonización (ecuaciones 3.17, 3.18 y 3.19), (ii) el estimador geométrico tiene un menor error de predicción comparado con el filtro extendido de Kalman convencional (FEKC) (figura 3.4) y (iii) como era esperado de la equivalencia del filtro extendido de Kalman y el estimador geométrico, el EG y el FEKG exhiben básicamente el mismo desempeño (figuras 3.3 y 3.4).

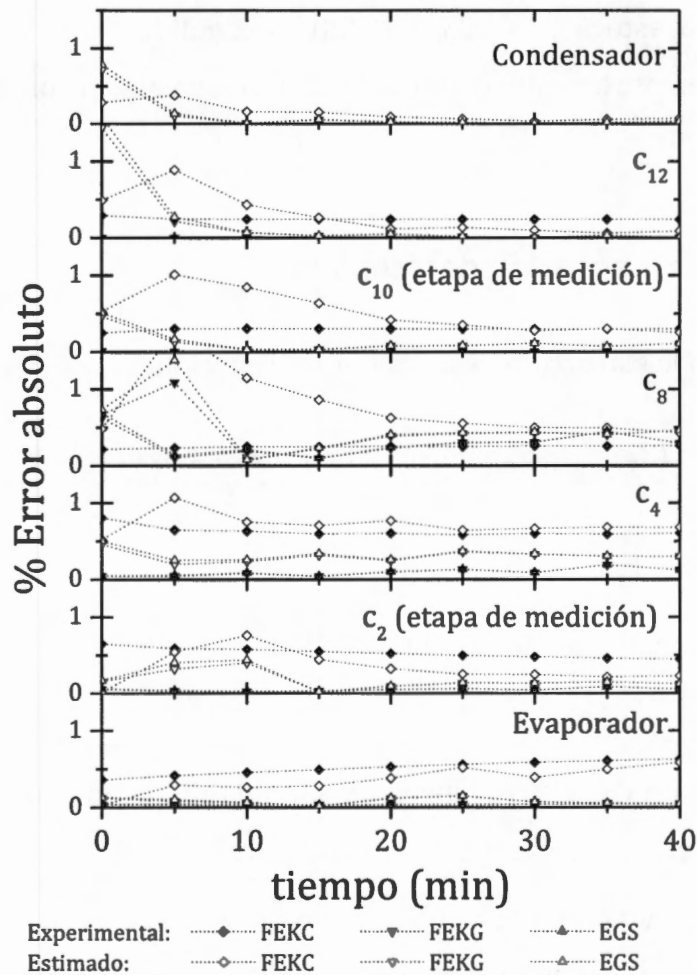


Figura 3.5. Predicción del error de estimación para la inferencia de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico estocástico (EG), el filtro extendido de Kalman geométrico (FEKG) y el filtro extendido de Kalman convencional (FEKC), usando dos mediciones (etapas 2 y 10) e innovando en todas las etapas.

Los estimados de la *incertidumbre* correspondientes a la estructura definida por las ecuaciones 3.21 y 3.22 (para los tres estimadores mostrados en la figura 3.3) son presentados en la figura 3.5, y muestran que: (i) los tres estimadores llevan al mismo resultado en general, con predicciones del error que están muy cercanas de los valores experimentales, (ii) de acuerdo a la equivalencia del filtro extendido de Kalman (FEK) y el estimador geométrico (EG), el estimador geométrico estocástico (EGS) y el filtro del Kalman geométrico (FEKG) dan resultados similares, y (iii) el estimador geométrico estocástico EGS y el filtro extendido de Kalman geométrico (FEKG) superan levemente a el filtro extendido de Kalman convencional (FEKC).

3.2.3 Estimación con innovación desacoplada

Tomando de nuevo la estructura descrita por las ecuaciones 3.21 y 3.22:

$$\sigma = (\kappa, x_i = x), \quad n = 12, \quad x_i = (c_1, \dots, c_{12})', \quad \kappa_s = \kappa_e = 6 \quad (3.21)$$

$$y = (\beta(\hat{c}_2), \beta(\hat{c}_{10})) \quad (3.22)$$

se plantea el desacoplamiento de las innovaciones de cada medición (ver sección 2.3.4).

Tomando un valor de $\zeta = 2^{1/2}$, las guías de sintonía del estimador nos lleva a un valor de $n_\omega = 10$ para el caso desacoplado. En las figuras 3.6 y 3.7 son presentados los resultados con desacoplamiento ($n_\omega = 10$) y acoplamiento ($n_\omega = 6$) de las innovaciones. Las desconexiones facilitan y simplifican la tarea de estimación, ya que como se puede ver en las figuras 3.6 y 3.7, el esquema desacoplado tiene un mejor comportamiento en el inicio del experimento y se pudo sintonizar con velocidad de convergencia mayor. En el esquema de innovación desacoplada, las acciones integrales de cada medición corrigen los errores de desacoplamientos en el estimador.

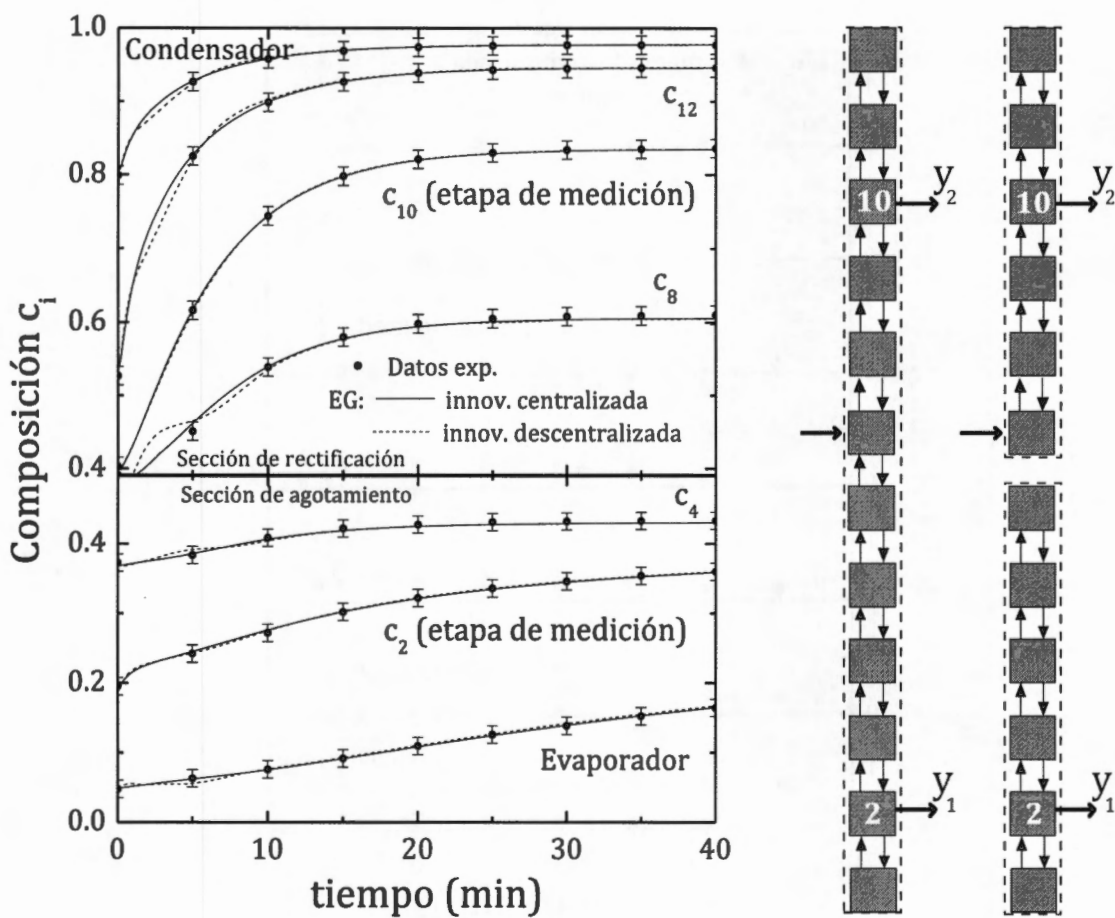


Figura 3.6. Estimación de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico (EG), comparando el desempeño del estimador ante desacoplamientos de las innovaciones.

El esquema de la derecha de la figura 3.6 representa a las etapas del sistema, y muestra el desacoplamiento de modelo e innovación en la segunda columna. Las figuras 3.6 y 3.7 muestran que, como era de esperarse, el caso con desacoplamiento tiene un mejor desempeño y puede implementarse el estimador con una ganancia más rápida.

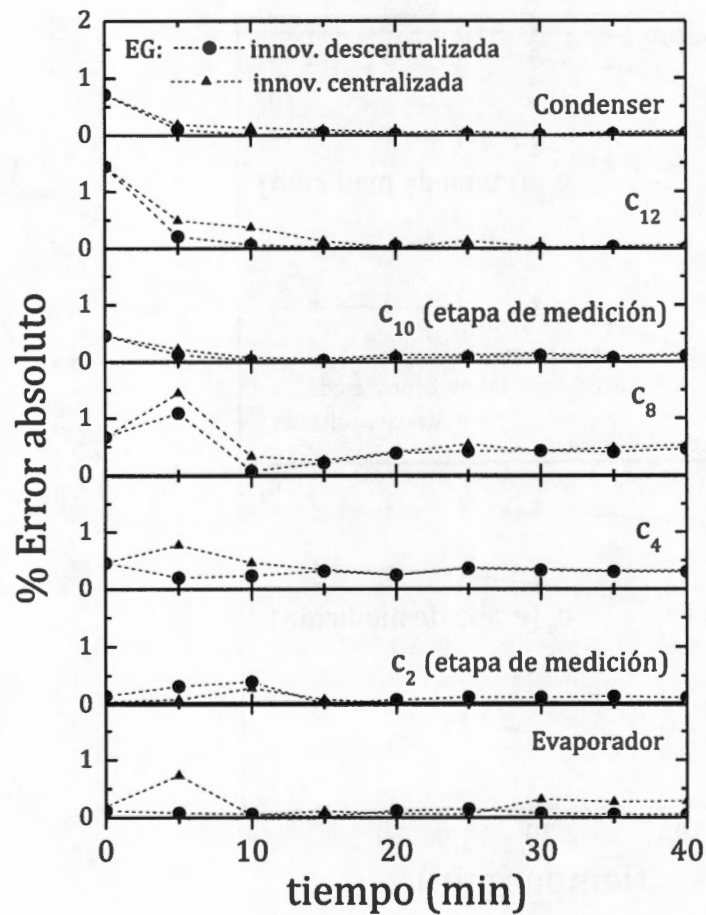


Figura 3.7. Error de estimación para la inferencia de perfil completo de composiciones con el estimador geométrico (EG), comparando el desempeño del estimador ante desacoplamientos de las innovaciones.

3.3 Estimación con modelo truncado e innovación parcial

Hasta este punto se han implementado los estimadores con modelo completo e innovación en todas las etapas. Para continuar con la validación del estimador geométrico se verán los casos de innovación parcial y modelo truncado. En esta

situación se implementa el estimador geométrico original (EGO, secciones 2.3.2 y 3.1.1) y se compara con el rediseño (EG, secciones 2.3.3 y 3.1.2).

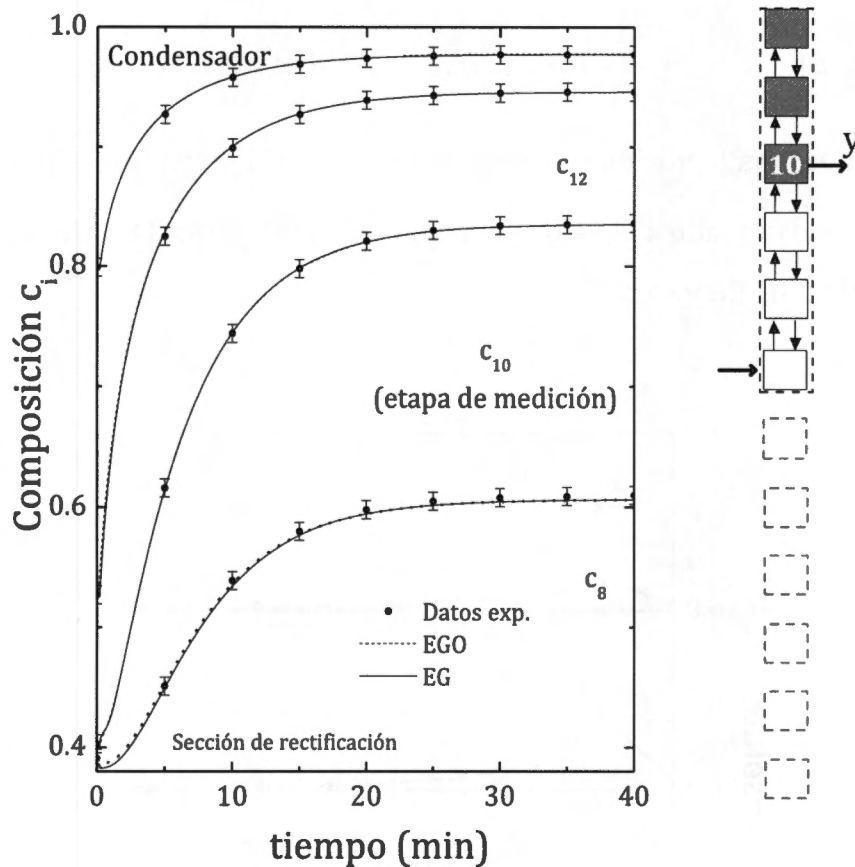


Figura 3.8. Estimación de perfil de composiciones en la sección de rectificación con el estimador geométrico (EG) y el estimador geométrico original (EGO), usando una medición (etapa 10) e innovando en tres etapas (10, 11 y 12) de seis modeladas (de la 7 a la 12).

3.3.1 Estimación en la sección de rectificación.

Considerando que solamente las composiciones de la sección de rectificación deben ser estimadas, tomando el modelo completo de estimación de la columna de

destilación (ecuaciones 2.9 y 2.10), descartamos la dinámica de la sección de agotamiento y obtenemos el siguiente modelo:

$$\dot{\hat{c}}_i^e = f_i^e(\hat{c}_i^e, \hat{c}_v^s, u), \quad y = \beta(\hat{c}_{10}), \quad \hat{c}_i^e = (\hat{c}_{10}, \hat{c}_{11}, \hat{c}_{12})' \quad (3.23)$$

$$\dot{\hat{c}}_v^e = f_v^e(\hat{c}_v^s, \hat{c}_i^e, \hat{c}_6, u), \quad \hat{c}_v^e = (\hat{c}_7, \hat{c}_8, \hat{c}_9)', \quad n = 6, \kappa_i = 3 \quad (3.24)$$

con seis estados, una medición (etapa 10), tres estados innovados (o no innovados) \hat{c}_i^s (o \hat{c}_v^s), y el estado c_6 fijado a el valor nominal \hat{c}_6 . En las figuras 3.8 y 3.9 se muestran la implementación del EG y se compara con el EGO.

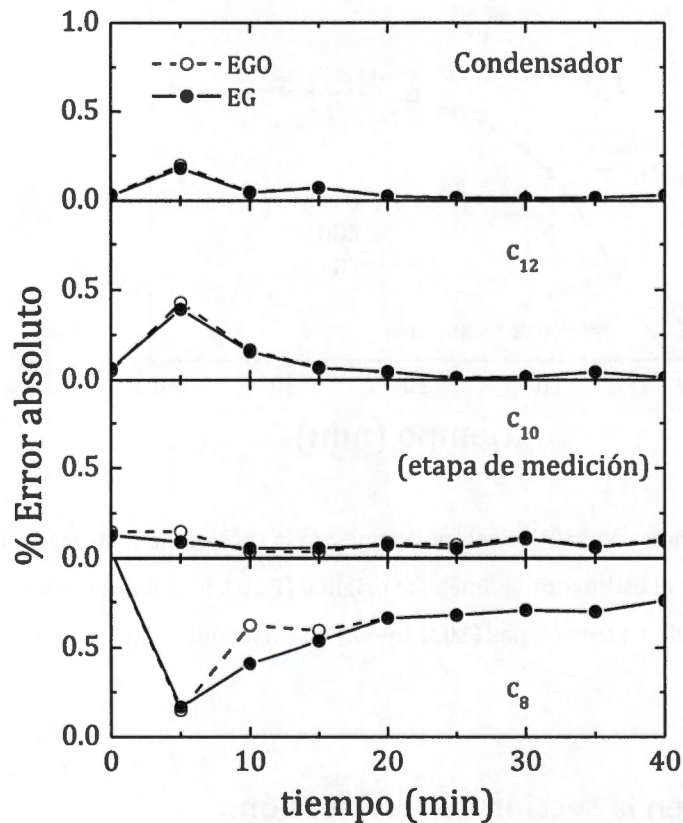


Figura 3.9. Error de estimación para la inferencia del perfil de composiciones en la sección de rectificación con el estimador geométrico (EG) y el estimador geométrico original (EGO), usando una medición e innovando en tres etapas de seis modeladas.

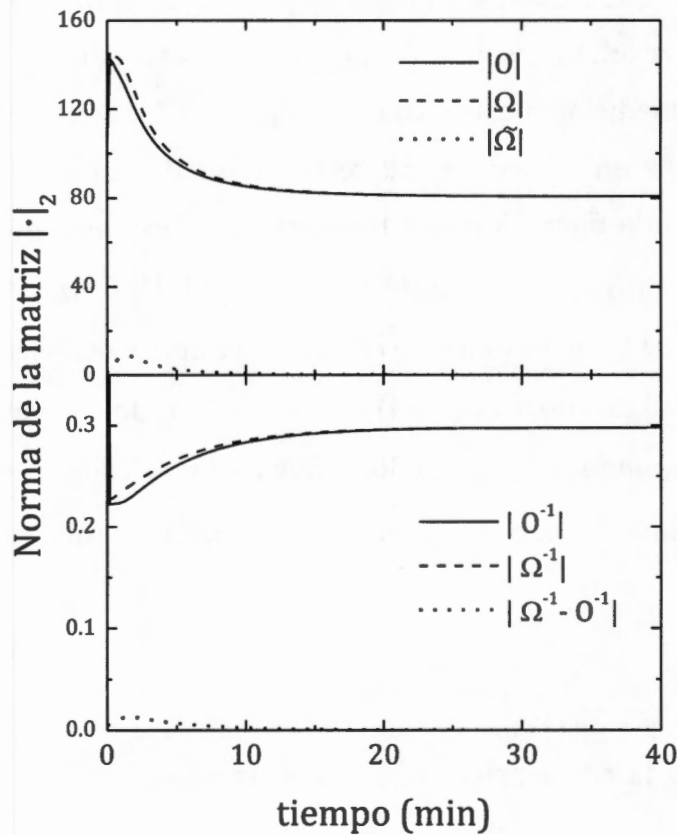


Figura 3.10. Normas de la matriz de estimación para la sección de rectificación con el estimador geométrico (O) y el estimador geométrico original (Ω), usando una medición e innovando en tres etapas de seis modeladas.

El esquema de la derecha de la figura 3.8 representa a las etapas del sistema, donde los cuadros con líneas punteadas representan a las etapas no modeladas para la estructura descrita por las ecuaciones 3.23 y 3.24. El estimador geométrico original (EGO) fue implementado con la matriz Ω exacta con fines de comparación del comportamiento y valoración del error de la aproximación de la matriz de estimación. Siguiendo las guías de sintonía del estimador geométrico obtenemos el par $(\zeta, n_\omega) \approx (1.5, 10)$. Las respuestas del estimador geométrico original (EGO) con Ω y el estimador

geométrico (EG) con O basados en un modelo truncado se presentan en las figuras 3.8, 3.9 y 3.10, mostrando que los dos estimadores: (i) exhiben el mismo comportamiento entre sí, (ii) llevan a resultados similares que los estimadores mostrados con modelo completo y una sola medición mostrados en las figuras 3.1 y 3.2, y (iii) también llevan a resultados similares en la sección de rectificación del caso de dos mediciones (figuras 3.3 y 3.4). En la figura 3.10 se muestra la correspondiente evolución de la norma de las matrices $|O|_2$, $|\Omega|_2$, $|\tilde{\Omega}|_2$, $|O^{-1}|_2$, $|\Omega^{-1}|_2$, and $|\Omega^{-1} - O^{-1}|_2$, y se encuentra que: (i) de hecho, la matriz Ω , que es difícil de construir, es aproximada correctamente por la matriz O que es fácil de construir, y (ii) como es esperado, los valores más grande del error $|\tilde{\Omega}|$ corresponde a los periodos inmediatos al cambio en escalón de la operación de la columna, cuando las dinámicas no modeladas contenidas en Ω afectan fuertemente.

3.3.2 Estimación de la composición de los efluentes

Considerando que la composición de los efluentes debe de ser estimada con dos composiciones, consideremos el siguiente modelo truncado:

$$\dot{\hat{c}}_i^s = f_i^s(\hat{c}_i^s, \bar{c}_4, u), \quad y = \beta(\hat{c}_1), \quad \hat{c}_i^s = (\hat{c}_1, \hat{c}_2, \hat{c}_3)', \quad n_s = 3, \quad \kappa_i^s = 3 \quad (3.25)$$

$$\dot{\hat{c}}_i^e = f_i^e(\hat{c}_i^e, \bar{c}_9, u), \quad y = \beta(\hat{c}_{10}), \quad \hat{c}_i^e = (\hat{c}_{10}, \hat{c}_{11}, \hat{c}_{12})', \quad n_e = 3, \quad \kappa_i^e = 3 \quad (3.26)$$

hecho de dos subsistemas desacoplados observables de tres estados cada uno. Siguiendo las guías de sintonía del estimador geométrico obtenemos el par $(\zeta, n_w) = (1.5, 12)$. Las composiciones de los extremos de los dos subsistemas donde está el truncamiento del modelo, los estados c_4 y c_9 se fijan a los valores nominales \bar{c}_4 y \bar{c}_9 .

El comportamiento del estimador geométrico original (EGO) con 8 ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs), el filtro extendido de Kalman convencional (FEKC)

con 20 ODEs y el estimador geométrico (EG) rediseñado se presentan en las figuras 3.11 y 3.12.

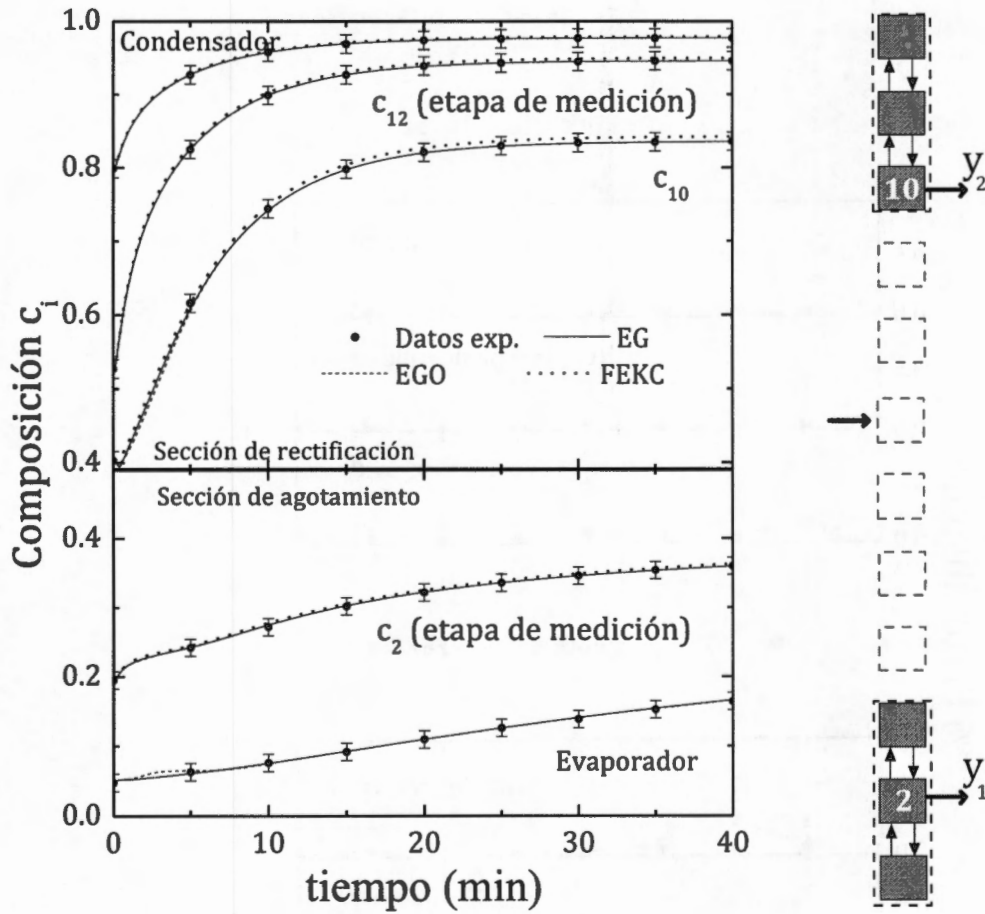


Figura 3.11. Estimación de perfil de composiciones en dos subsistemas de tres etapas cada uno, con el estimador geométrico (EG), el estimador geométrico original (EGO) y el filtro extendido de Kalman (FEKC), usando dos mediciones e innovando en tres etapas cada una.

En estas figuras se muestra que: (i) los tres estimadores llevan a un desempeño general similar, (ii) el estimador geométrico (EG) y el estimador geométrico original (EGO) tienen un desempeño ligeramente mejor que el filtro extendido de Kalman

(FEKC), y (iii) los resultados son similares a los estimadores que usan al modelo completo e innovan con dos mediciones de manera desacoplada (figuras 3.6 y 3.7). De nuevo, cabe mencionar que el EGO con la matriz Ω es difícil de construir y es aproximado de manera correcta por el EG con la matriz O , y este último es fácil de construir.

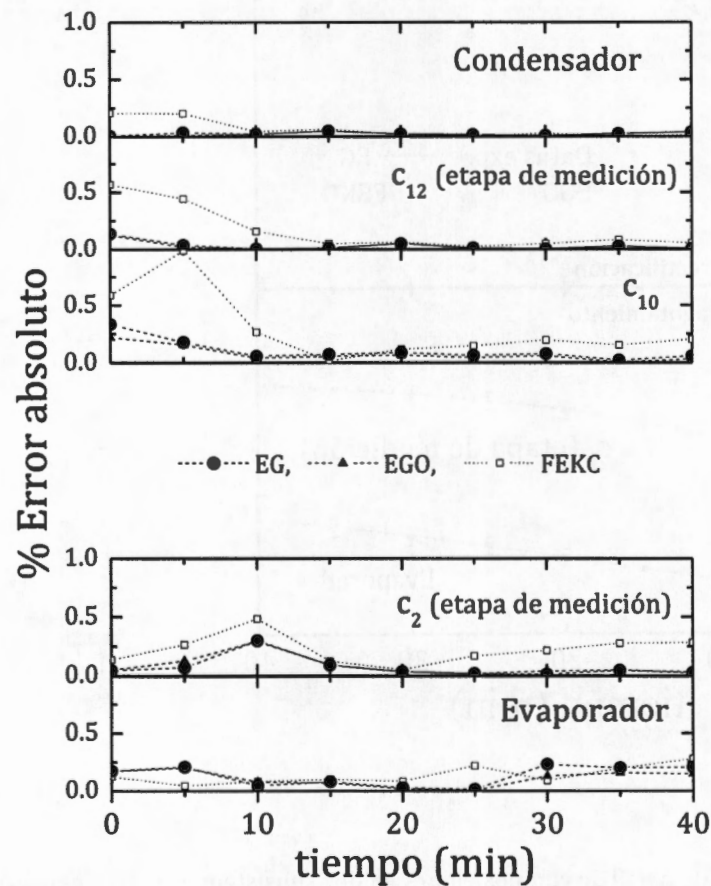


Figura 3.12. Error de estimación para la inferencia de las composiciones en dos subsistemas de tres etapas cada uno, con el estimador geométrico (EG), el estimador geométrico original (EGO) y el filtro extendido de Kalman (FEKC), usando una medición e innovando en tres etapas en cada subsistema.

3.4 Resultados

Con el estudio de la columna de destilación y datos experimentales se verificó que: (i) el obstáculo de las derivadas de Lie en el estimador geométrico original (EGO) es removido efectivamente con el rediseño del estimador geométrico (EG), (ii) el estimador geométrico, que no tiene las ecuaciones dinámicas de Riccati (ERs), es equivalente en funcionamiento al filtro extendido de Kalman convencional (FEKC), y tiene un equivalente teórico bajo una estructura estocástica en particular (basada en el método geométrico) y (iii) el estimador geométrico estocástico efectivamente efectúa la tarea de estimación de la incertidumbre. Comparando con el FEKC, el estimador EG tiene un método más simple y más eficiente de modelar la incertidumbre y realizar la sintonización. La ventaja de elegir el modelo de estimación en base de los objetivos específicos de estimación fue confirmada.

Una vez que el problema estructural de asimilación de información por las mediciones es adecuadamente resuelto vía el método de estimación geométrica, y se deja a un lado la comparación en términos de dimensionalidad y complejidad, las tareas de estimación de los estados y de la incertidumbre se pueden realizar adecuadamente y de igual manera con cualquier ley de estimación (EG, FEKG, EGS o FEKC) bien sintonizada.

La elección del modelo de estimación en base de los objetivos específicos de estimación nos permite trabajar con el modelo *completo* o *truncado*, y nos facilitan la tarea de estimación. Los truncamientos del modelo (por ejemplo eliminar la zona intermedia de la columna) nos permiten un mejor desempeño en la implementación de un estimador, y nos da la posibilidad de dar ganancias más rápidas. De igual manera cuando se tienen múltiples mediciones, se mostró que el caso de implementar el estimador con desacoplamiento en las innovaciones tiene un mejor desempeño y se puede implementar con una ganancia más rápida.

Estos hallazgos nos sugieren que en adelante se implementen los estimadores que tengan múltiples mediciones con desacoplamiento en la innovación. Con el desacoplamiento podemos asociar ciertas composiciones a cada medición y esta consideración será explotada en el siguiente capítulo.

4. ESTRATEGIA ESTRUCTURAL

En este capítulo, el método de estimación geométrica de estructura ajustable, descrito en el capítulo anterior, es aplicado al problema de estimación de una columna de destilación binaria, con énfasis en la interacción entre la estructura de estimación, el mecanismo de la asimilación de los datos, el objetivo de estimación, y teniendo en cuenta las características la columna de destilación. Se plantea una metodología para abordar y resolver el problema de la selección de la estructura de estimación con el mejor desempeño frente a un objetivo específico de estimación, tomando en cuenta las características (i) de sistema por etapas de la columna de destilación y (ii) del enfoque Geométrico (estimador geométrico rediseñado). Dicho enfoque geométrico ofrece una fácil implementación de un estimador con un manejo robusto de altos órdenes de estimación.

A STRATEGIA ESTRUTURAL

Este trabalho apresenta uma análise estrutural da estratégia de desenvolvimento econômico do Brasil, com o objetivo de identificar os fatores que influenciaram o crescimento econômico do país durante o período de 1964 a 1980. A metodologia utilizada foi a análise de regressão múltipla, com o uso de dados secundários. Os resultados indicam que a estratégia de desenvolvimento econômico do Brasil foi influenciada por fatores estruturais, tais como a estrutura da economia, a estrutura da indústria e a estrutura do comércio exterior. A análise também mostrou que a estratégia de desenvolvimento econômico do Brasil foi influenciada por fatores institucionais, tais como a estrutura do sistema financeiro e a estrutura do sistema de planejamento econômico. Os resultados sugerem que a estratégia de desenvolvimento econômico do Brasil foi influenciada por fatores estruturais e institucionais, e que a melhoria da estrutura econômica e institucional é essencial para o crescimento econômico do país.

4.1 Enfoque estructural

Habiendo verificado las posibilidades estructurales del estimador geométrico de propósito general en la columna de destilación (capítulo 3), en este capítulo se plantea la estrategia para abordar y resolver el problema de la selección de la estructura de estimación con el mejor desempeño frente a un objetivo específico de estimación.

Esta metodología consta de dos etapas que delimitan a la estrategia estructural: (i) una de análisis en la que se combinan la característica por etapas de la columna con el enfoque de estimación geométrica y sus posibilidades (facilidad de implementación, robustez, manejo de altos ordenes de estimación, posibilidad de usar modelo truncado y descentralización del modelo y/o innovación) para, dado un objetivo específico (perfil completo o parcial, dos efluentes o un efluente), obtener un conjunto de estructuras candidatas para realizar la tarea de estimación, y (ii) una etapa de síntesis en la que se determina cuál es la estructura que, para un objetivo específico, tiene el mejor funcionamiento en la implementación del estimador geométrico. Para verificar la independencia del resultado estructural con respecto al tipo de estimador, algunas de las mejores estructuras se implementan con el estimador geométrico y el filtro extendido de Kalman.

En las siguientes secciones de este capítulo, se emplean conceptos tales como: *modularización* (modelo por módulos) y *medidas de observabilidad* frente a objetivos de estimación como ingredientes clave para determinar la mejor estructura de estimación.

4.2 Estructuras de Estimación

La elección del modelo de estimación en base de los objetivos específicos de estimación facilita la tarea de estimación, en cuanto a diseño de la estructura de estimación (ecuación 2.14). Un resultado muy importante y que facilita aún más la

tarea de estimación es el caso de implementar el estimador con desacoplamiento en las innovaciones (sección 3.2.3). Esto último nos lleva a un mejor desempeño y a que se puede implementar el estimador con una ganancia más rápida en comparación a un caso con innovación completamente acoplada. Con el desacoplamiento podemos asociar un conjunto de ciertas composiciones a una medición.

El conjunto de *estructuras de estimación admisibles* σ está denotado por S_A , y el subconjunto de estructuras *detectables* por S_D (López y Álvarez, 2004; Álvarez y Fernández, 2009):

$$S_A = \{\sigma \mid c(t) \text{ es } \sigma\text{-detectable}\}; \quad S_D = \{\sigma \in S_A \mid \kappa_D = \max_{S_A} \kappa_i\}$$

La estructura detectable implica una dimensión κ_D máxima de los estados innovados, una velocidad de reconstrucción mayor, y una menor robustez. Para la estructura con corrección en una etapa tenemos una dimensión de los estados innovados mínima, una velocidad de reconstrucción menor, pero una mayor robustez. La selección de la estructura significa una búsqueda del compromiso conveniente entre velocidad de reconstrucción de los estados estimados contra la tolerancia a errores de medición y modelado (robustez). En nuestro caso experimental con una columna de destilación con 12 etapas y hasta 12 mediciones de temperatura ($n=12$, $1 \leq m \leq 12$, y $1 \leq \kappa_i \leq 12$), tenemos 527,345 estructuras admisibles (cardinalidad de S_A) y 4,095 estructuras observables (cardinalidad de S_D).

Originalmente la estructura de estimación σ para el estimador geométrico está definida por:

$$\sigma = (\kappa, c_I, c_V): \kappa = (\kappa_1, \dots, \kappa_m)', (c_I', c_V')' = I_X C \quad (4.1)$$

Donde κ es el orden del vector de estimación, c_I, c_V es la partición de estados innovados y no innovados, y κ_i es el orden de estimación asociado con la i -ésima medición. Básicamente, la σ -detectabilidad (Álvarez y Fernández, 2009) es una versión orientada a robustez, que permite tener como grado de libertad a la

asignación de los estados innovados de la definición de κ -detectabilidad que divide a los estados en observables y no observables (Sontag, 2000; López y Álvarez, 2004).

Sin embargo la definición anterior de estructura (ecuación 4.1) no es suficiente para el caso de los procesos por etapas, o con desacoplamientos en las innovaciones de un estimador. Es necesario tomar la partición de estados innovados y no innovados (c_i - c_v) y, a su vez, hacer una partición extra que corresponda a la asociación de las mediciones con los estados innovados (figura 4.1).

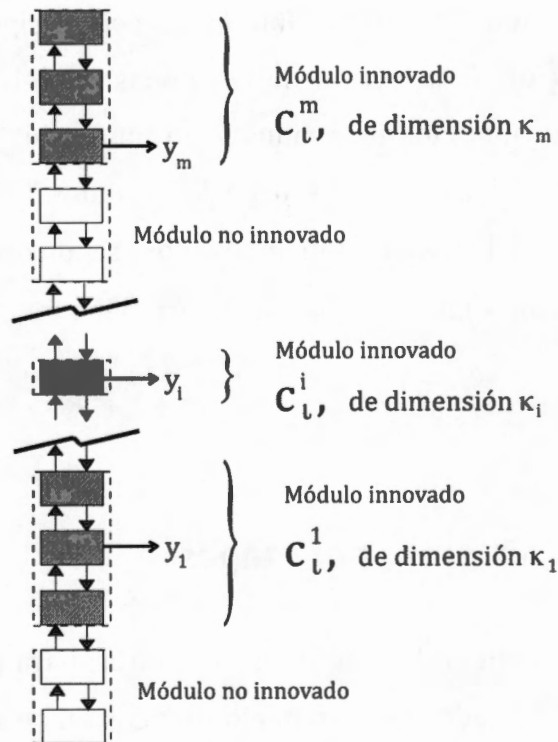


Figura 4.1. Estructura de estimación definida por Módulos.

Definiremos como un **módulo innovado** al conjunto de composiciones innovadas asociadas con una medición; el conjunto de los m módulos innovados (uno por medición) corresponden a la dinámica innovada c_i :

$$c_i = (c_i^1, \dots, c_i^m)', \quad \dim c_i = \kappa, \quad \dim c_i^l = \kappa_l \quad (4.2)$$

donde c_i corresponde al i -ésimo módulo innovado asociado a la i -ésima medición y este corresponde a un grado de libertad en el diseño de la estructura de estimación. Las características y tipos de módulos se explicarán adelante en la sección 4.2. Los módulos que contienen a los estados no innovados denotados por c_v , los definiremos como **módulos no innovados** y son otro grado de libertad que se tiene, ya que las composiciones no innovadas se pueden considerar o descartar en el modelo de estimación de acuerdo al objetivo de estimación. En la figura 4.1 se muestra un ejemplo de estructura.

En el caso de la columna de destilación, *la estructura* significa: el número de las mediciones, su ubicación, la selección de la dimensión del modelo, la partición en estados (agrupados en módulos innovados y no innovados), y la dimensión de los módulos innovados (es decir el número de los estados innovados por medición). Cuando los n estados del modelo son innovados, se dice que la estructura tiene innovación completa con κ igual a n . La estructura tiene innovación parcial cuando κ es menor o igual a n .

4.3 Estimación en sistemas por etapas

Como se ha mencionado en los capítulos anteriores, para propósitos generales de estimación de todos los estados de un modelo (dimensión de x_t igual a n), el problema del diseño de las estructuras de estimación en procesos por etapas es complejo. Esto es debido a que hay un gran número de casos para evaluar por las posibilidades de partición entre los estados (innovados y no innovados), las mediciones (ubicación y número), y las consideraciones estructurales por los altos órdenes de estimación. Dicha situación se complica aún más con la consideración de tomar como grado de libertad a la selección del modelo. Sin embargo como los estados de un proceso por etapas son una secuencia ordenada con propiedades de continuidad sobre un dominio espacial discreto, se tiene que las características por etapas son una restricción inherente del proceso que resulta benéfica para la tarea de la estimación.

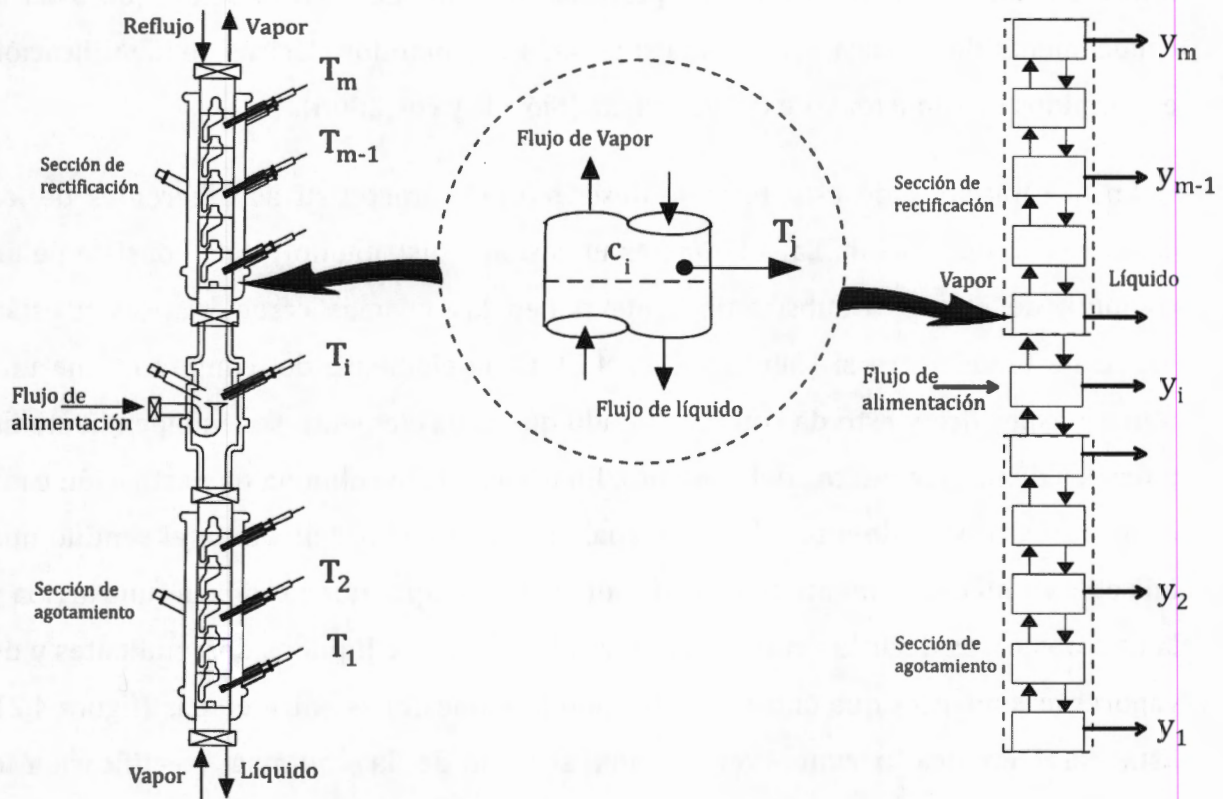


Figura 4.2. Representación esquemática de las etapas de una la columna de destilación.

Es una situación típica en el modelado que el modelo completo de un sistema esté formado de submodelos más simples. Esta idea aplica para todo tipo de sistemas. El modelo completo puede ser muy complejo, mientras que los **submodelos** o **módulos** se pueden comprender y analizar sin muchas complicaciones. En este capítulo describiremos un procedimiento simple para decidir qué etapas de la columna de destilación se deben considerar en el estimador, basado en las características de sistema por etapas y en base a un objetivo de estimación. Ya que la columna es un sistema ordenado cuyas conexiones (flujo de información) están bien definidas, la selección de la dimensión del submodelo se hará sin pasar a través de alguna técnica de identificación matemática. Normalmente las técnicas de identificación se modelan

en términos de formas canónicas que funcionan como cajas negras y no tienen interpretación física (Ljung, 1999), pero los métodos de identificación que usan el conocimiento de la física del sistema superan a los métodos clásicos de identificación en términos de robustez y de convergencia (Sjövall, y col. 2006).

En el capítulo 2 de esta tesis se describió las características inherentes de las columnas de destilación. La columna es un sistema distribuido y éste consiste de un conjunto de etapas o subsistemas que tienen las mismas características y están interconectados entre sí (figuras 4.1 y 4.2). Cada elemento del conjunto tiene una función específica y esto da como resultado que cada elemento sea independiente de todos los demás elementos del conjunto. En el caso de la columna de destilación cada elemento corresponde a un plato o etapa. El sistema es ordenado en el sentido que una etapa o plato solamente tiene conexión con las etapas que lo rodean (una arriba y la otra abajo), es decir las etapas contiguas. Los flujos de líquidos descendientes y de vapores ascendentes que entran o salen son las conexiones entre etapas (figura 4.2). Esta característica permite ver a cada sección de la columna (rectificación o agotamiento) como un submodelo, los cuales están conectados por los flujos de líquido y vapor.

4.3.1 Tipos de módulos y características

Se ha visto en el capítulo 3 que para una estructura de estimación en particular, los resultados obtenidos con el método geométrico aplican a cualquier técnica de estimación. La primera manera de entender la clase de las conexiones que existen entre las etapas de la columna es visualizar cada plato como un subsistema. Tomando dos platos contiguos con mediciones de temperatura en ambos platos e implementando un estimador (como los descritos en el capítulo 3), vemos que existen dos tipos de conexión: una para la transmisión de información entre los platos dados por los balances de materia y otro para los estimadores por el flujo de información de

las mediciones. En la figura 4.3 se muestran las interconexiones posibles para dos etapas como subsistemas.

Tomando los esquemas a) y c) de la figura 4.3, tenemos un estimador con acoplamiento en las ecuaciones de plato del modelo y con acoplamiento en la innovación del estimador. Un caso así corresponde a uno como el mostrado en la figura 3.3 del capítulo anterior. Tomando los esquemas a) y d) tenemos acoplamiento en el modelo y desacoplamiento en el estimador. Cuando se toman los esquemas b) y d) se tiene desacoplamiento entre los subsistemas del modelo y las innovaciones del estimador, y corresponde a un caso como el mostrado en la figura 3.6 del capítulo anterior. Este tipo de conexiones se dan entre etapas contiguas, y es bajo esta circunstancia en que el estimador puede ser diseñado.

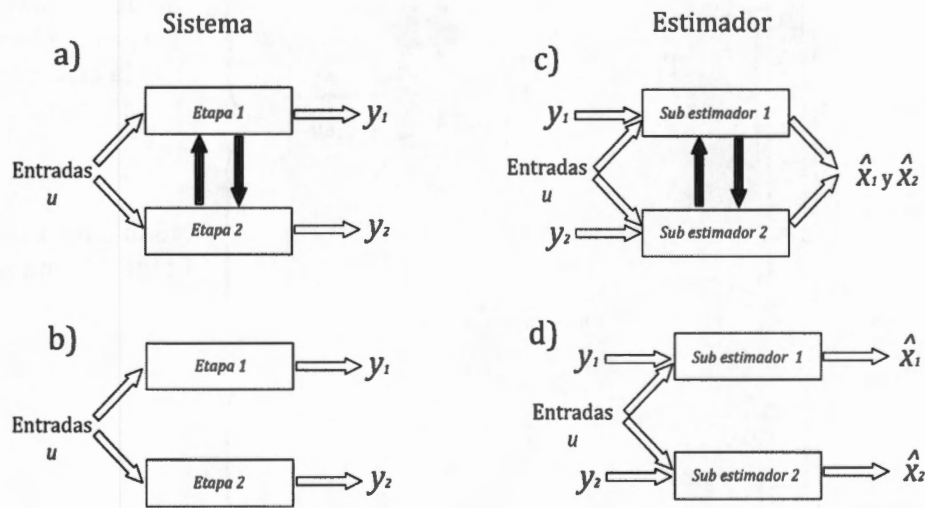


Figura 4.3. Representación de las conexiones entre etapas y algoritmos de estimación.

El sistema está de hecho de tal manera, que un estimador se puede considerar como la interconexión entre varios subsistemas que permiten la tarea de inferencia, aún si los estados de otros subsistemas no son conocidos. Con las interconexiones o desconexiones que se dan, el estimador candidato tiene la posibilidad de inferir las

composiciones de los subsistemas considerados en el modelo. Las desconexiones facilitan y simplifican la tarea de estimación.

Definimos como **módulo** al conjunto de una o varias etapas contiguas de la columna de destilación. Auxiliándonos de los resultados mostrados en la figura 3.8, del capítulo anterior, donde tenemos un estimador para la sección de rectificación e innovación en tres etapas de un total de 6 estados modelados y 6 descartados, explicaremos los diferentes tipos de módulos que existen en la columna de destilación. En la figura 4.4 mostramos el esquema de estimación del caso mencionado, mostrando la columna experimental de destilación y una representación esquemática de las etapas de la columna.

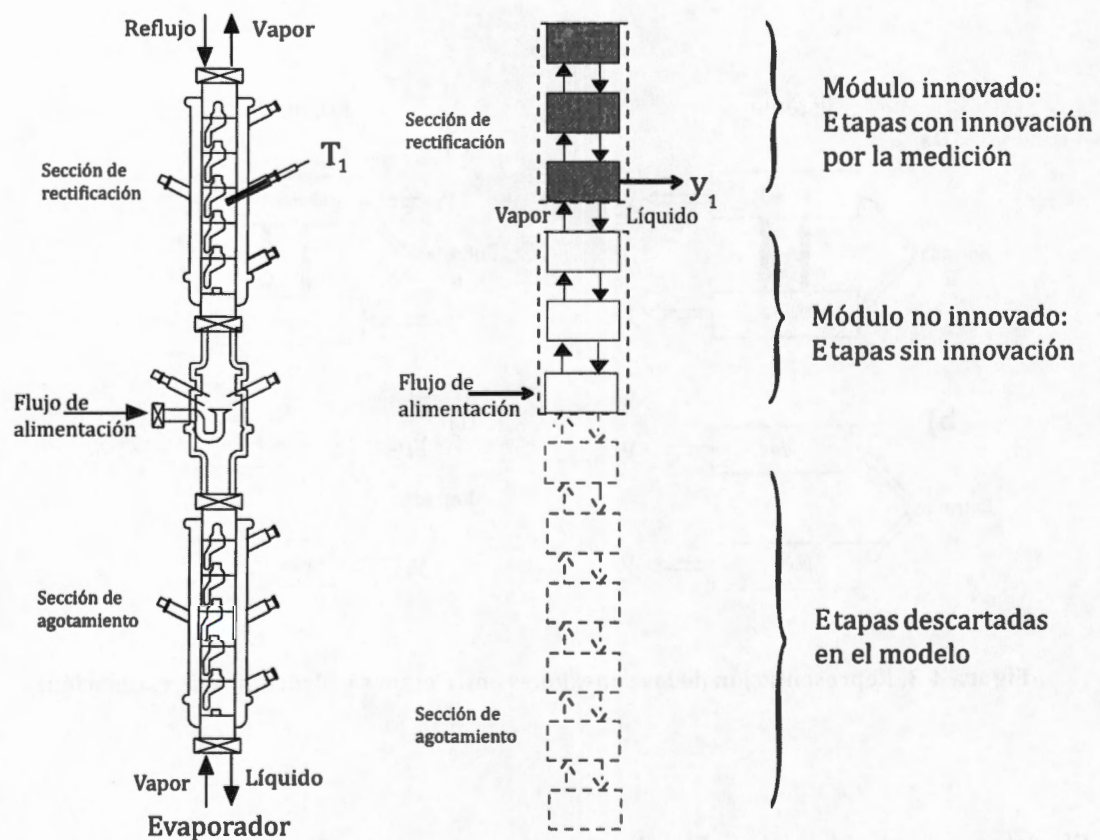


Figura 4.4. Ejemplo de una estructura de estimación.

La figura 4.4 muestra una columna de destilación con dos módulos, es decir 2 agrupaciones de 3 etapas cada uno. Así tenemos que los estados innovados asociados a la medición de temperatura (etapas sombreadas en la figura 4.4) definen a un **módulo innovado**. Un módulo innovado es un conjunto de etapas contiguas que tiene inyección de información de una sola medición. Al conjunto de etapas contiguas que no tiene corrección por alguna medición, se le define como un **módulo no innovado** (etapas en color blanco en la figura 4.4). Cada composición innovada sólo puede pertenecer a un módulo. Mantener un módulo no innovado en el modelo tiene el propósito de transmitir información entre módulos innovados o en ciertos caso llegar a las concertaciones del los efluentes, cuando éstas se encuentran en zonas pobremente observables. Las etapas que están representas con líneas punteadas representan a la parte de modelo que se descarta para el diseño del estimador. La acción integral del estimador geométrico (ecuación 3.8) permite el truncamiento y la composición en el límite descartado puede ser fijada a un valor constante. Así, en el caso de procesos por etapas, la estructura de estimación es equivalente a la configuración modular descrita anteriormente con m módulos innovados, uno para cada medición, y los módulos no innovados, donde los órdenes de estimación (κ_i) son las dimensiones de los módulos innovados. Así, elegir la configuración modular es equivalente a elegir la estructura de estimación.

Si se está interesado en sólo estimar uno o algunos estados en un módulo, la dependencia con los estados de otro módulo puede descartarse fijando la entrada al módulo que se desea estimar en algún valor medio constante, esto en el entendido de que este error modelado puede ser manejado por el componente de la acción integral, y dando como resultado a un **módulo innovado descentralizado** (Figura 4.5). Esta situación es presentada en estructura de estimación mostrada en la figura 3.11 del capítulo anterior con módulos completamente desconectados.

Resumiendo, las decisiones estructurales en el estimador son: (i) la agrupación de los estados en módulos innovados o no innovados, (ii) la ubicación y dimensión del

módulo en el proceso por etapas, (iii) la ubicación de la medición en el módulo, y (iv) el uso o no de desacoplamientos en la estructura de estimación. Esta decisión estructural debe hacerse en base al objetivo de estimación (perfil completo o parcial), la sensibilidad de la señal de la medición con respecto a los cambios en la relación entre la medición y los estados, y tomando en cuenta al mecanismo de intercambio de información entre los módulos.

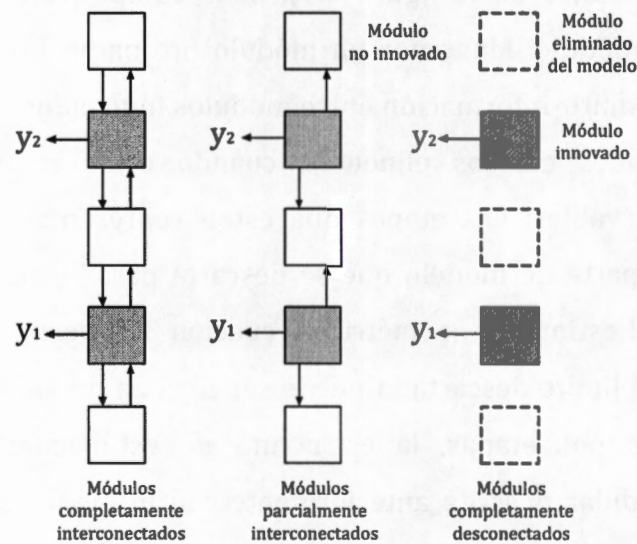


Figura 4.5. Tipos de desacoplamientos en los módulos.

4.4 Medidas de detectabilidad y ubicación de mediciones

La selección de la estructura de estimabilidad no es trivial. En las secciones 1.3 y 1.4 de esta tesis se presenta la literatura que se encuentra para abordar el problema de la selección de estructura. Con base a lo reportado, en esta sección se presentan las medidas de estimabilidad para el estimador geométrico, y debido a que la mayoría de trabajos para procesos por etapas que se muestran en la tabla 1.2 usan a los gramianos de observabilidad, también se definen para evaluarlos por propósitos de comparación.

4.4.1 Medidas para el presente trabajo

En esta sección la selección de la estructura es realizada en base a: (i) las características de sistema por etapas del proceso, en el sentido de la monotonicidad del perfil (Sontag, 2000), es decir la característica del ordenamiento de las composiciones en las etapas y su cambio unidireccional con las entradas exógenas, y (ii) las medidas de estimabilidad del método geométrico de estimación (López y Álvarez, 2004), con la diferencia de usar la matriz aproximada $O(\hat{c}, u, \kappa)$ [ecuación 3.9]. Las medidas de estimabilidad están definidas como sigue:

$$\mu_c = cn[O(\hat{c}, u, \kappa)], \quad \mu_s = \sigma_{min}^{-1}[O(\hat{c}, u, \kappa)] \quad (4.3)$$

$$\mu_c^v = cn[J(\hat{c}, u, \kappa)], \quad \lambda_v = \min [-Re(\lambda_1), \dots, -Re(\lambda_{n-\kappa})] \quad (4.4)$$

$$J(\hat{c}, u, \kappa) = (F + F')/2, \quad F(\hat{c}, u, \kappa) = (\partial_{x_v} f_v + \partial_{x_i} f_v)(\partial_{x_v} x_i)(x, u, \kappa), \quad F x_i = \lambda_i x_i \quad (4.5)$$

Donde $cn(\cdot)$ es el número de condición de (\cdot) , $\sigma_{min}(\cdot)$ es el valor singular mínimo de (\cdot) , μ_c es la medida del mal condicionamiento numérico de la matriz de estimación O , μ_s es la medida de singularidad de O , μ_c^v es la medida del mal condicionamiento numérico de la dinámica no innovada y λ_v es la medida del margen de estabilidad (velocidad de reconstrucción) de la dinámica no innovada. Conforme se aumenta la dimensión de los estados innovados (módulos innovados grandes): (i) la medida del mal condicionamiento numérico (μ_c) y la de singularidad (μ_s) de la matriz de estimación crecen, es decir la propagación del error en el modelo crece por la inyección de información de la medición, y (ii) el mal condicionamiento de la dinámica no innovada disminuye, con el correspondiente aumento del margen de estabilidad. Estas características de la propagación del error deben ser considerados antes de la implementación de un estimador; sin embargo, también es importante mencionar que conforme se aumenta la dimensión de los módulos innovados, crece significativamente la velocidad de la reconstrucción en el estimador.

En las columnas de destilación, la interpretación de las medidas de estimabilidad nos permite suponer que:

- λ_v y μ_c^v crecen con el número de etapas, y es de esperarse que cuando el evaporador está incluido en la dinámica no innovada, aumente notablemente más.
- μ_s y μ_c crecen con el número de composiciones innovadas en módulos interconectados y conforme las composiciones estén cerca de la zona concentración de alta pureza del componente volátil o cerca de un azeótropo. Estas medidas de detectabilidad son inversamente proporcionales a la derivada de la función de punto de burbuja.

En nuestro caso, las mediciones están bien localizadas cuando: (i) la dinámica de los estados no innovados está bien condicionada y es razonablemente rápida, y tal vez sí el evaporador se encuentra como etapa innovada; (ii) básicamente, la valoración del estimador depende de las medidas de estimación en el transiente de la dinámica de innovación (μ_c) y los sesgos (off-set) asintóticos (μ_s).

4.4.2 Medidas en trabajos previos

Para propósitos de comparación y dado que es el criterio de ubicación de sensores más empleado en la literatura (como se puede ver en la tabla 1.2 de esta tesis), consideramos el par de medidas de detectabilidad (μ_c , μ_s) en base a la matriz Gramiana W_o (Hahn y Edgar, 2002). Para determinar cuando un sistema es observable en la trayectoria del tiempo t_0 a t_1 (para cualquier $t_1 > t_0$), se puede usar la matriz positiva definida como gramiano de observabilidad $W_o(t_1, t_0)_{(n \times n)}$:

$$W_o(t_1, t_0) = \int_{t_0}^{t_1} e^{A(t-t_0)} C^T C e^{A(t-t_0)} dt, \quad A = \partial f / \partial x, \quad C = \partial h / \partial x, \quad \dot{x} = f(x), \quad \dim x = n, \quad y = h(x)$$

Un estado $x(t_0)$ es no-observable si pertenece al espacio nulo de la matriz simétrica del gramiano de observabilidad. A y C son completamente observables si y sólo si

$W_o(t_0, t_1)$ es una matriz de rango completo n (no singular). Una solución analítica para la matriz Gramiana en la ecuación anterior puede ser encontrada solucionando la ecuación correspondiente de Lyapunov:

$$A'W_o(\infty, 0) + W_o(\infty, 0)A + C'C \equiv A'W_o + W_oA + C'C = 0 \quad (4.6)$$

en el caso especial de un sistema estable en la trayectoria del tiempo $t_0 = 0$ y $t_1 = \infty$.

Para el propósito de selección de mediciones se ha establecido que la matriz de observabilidad O y la matriz Gramiana de observabilidad W_o llevan a los mismos resultados en sistemas lineales (Johnson, 1969; Moore, 1981; Müller y Weber, 1972).

4.5 Resumen de la estrategia de estimación

La selección de la estructura de estimación, sobre una gran cantidad de candidatos, será hecha explotando la característica de etapas de la columna, sus balances de materia y características termodinámicas, así como de las características del método geométrico de estimación con estructura ajustable (López y Álvarez, 2004; Álvarez y Fernández, 2009).

Esto último nos permite plantear la estrategia para abordar el problema de selección de estructura. Una primera *etapa de análisis*, donde se proponen unas estructuras candidatas, que se resuelve en el capítulo 5; y una segunda *etapa de implementación*, donde se concluyen las mejores estructuras de estimación para objetivos específicos ante el desempeño de un estimador geométrico, y se resuelve en el capítulo 6. También en el capítulo 6 se hace la implementación del filtro extendido de Kalman para demostrar que las conclusiones de las mejores estructuras no dependen del algoritmo de estimación cuando está bien sintonizado.

5. ANÁLISIS ESTRUCTURAL

Siguiendo la estrategia estructural presentada antes, en este capítulo se trata la primera parte de dicha estrategia, que consiste en encontrar un conjunto de estructuras candidatas a ser evaluadas posteriormente en el capítulo 6 con la implementación de un estimador. Se combinan las características por etapas de la columna de destilación (descritas en los capítulos 2 y 4 de esta tesis) con el enfoque de estimación geométrica (capítulo 3) y sus posibilidades estructurales (facilidad de construcción, descentralización y robustez en manejo de altos ordenes de estimación) para, dado un objetivo específico, obtener un conjunto de estructuras candidatas para realizar la tarea de estimación, en base a combinación de la característica de sistema por etapas de la columna con medidas de detectabilidad.

5.1 Caracterización estructural

En este capítulo, se resuelve de manera manejable el problema de escoger la *mejor estructura* para objetivos específicos de estimación mediante una etapa de análisis estructural que nos lleva a unos resultados sugerentes. Se aplican los ingredientes metodológicos (modularización, medidas de estimabilidad) para obtener un conjunto de estructuras candidatas para un objetivo particular.

El problema de estimación planteado en esta tesis consiste en diseñar la estructura del estimador en una columna binaria, buscando la máxima simplicidad y el mejor desempeño en un estimador. Esta búsqueda se hará primero mediante el análisis de las medidas de estimabilidad (descritas en el capítulo 4) para una medición de temperatura, y variando el número de estados innovados, teniendo en mente los objetivos específicos de estimación (perfil completo o parcial, un ó dos efluentes). Se realiza el análisis utilizando los datos experimentales descritos en el capítulo 2 de esta tesis. En esta etapa se obtienen sugerencias que nos permiten plantear el diseño de un conjunto de unos estimadores candidatos para evaluar en el siguiente capítulo.

Por simplicidad y facilidad, primero se analiza el caso de una medición de temperatura. Se aplicaran las medidas de detectabilidad variando el número de estados para cada ubicación de la medición. Posteriormente se analizarán casos con más mediciones. También, para poder explicar de una manera clara y directa, se toma un estado estacionario ($t = 40$ min., de la trayectoria experimental descrita en el capítulo 2) y se aplican las medidas de detectabilidad. Esto no implica que dichas medidas estén restringidas a un estado estacionario.

5.2. Estructura con una medición

La aplicación de las medidas de detectabilidad (ecuaciones 4.3, 4.4 y 4.5) descritas en la sección anterior a nuestro caso de ejemplo (figuras 5.1 y 5.2) nos lleva a que la

columna de destilación binaria es completamente observable (nominalmente) con al menos una medición de temperatura en cualquier etapa, y esto concuerda con los trabajos previos en estimación de composiciones en destilación (Joseph y Brosilow, 1978; Yu y Luyben, 1987; Oisiovici y Cruz, 2000).

En la figura 5.1 se grafica a las dependencias de la medida de singularidad (μ_s) para la situación de una sola medición de temperatura y el grado de estimación κ (es decir, el número de estados a innovar). Se observa que, como era esperado, las innovaciones con dimensiones bajas tienen una propagación del error más pequeña por la inyección de información de la medición. Se ve en la figura 5.1 que más allá de seis etapas innovadas por medición, la medida de singularidad (μ_s) crece rápidamente, lo que resulta desfavorable para cada ubicación de la medición de temperatura. Prácticamente, lo mismo se observa en la figura 5.2 con la medida de mal condicionamiento (μ_c), que más allá de cinco etapa innovadas crece muy rápido. Las etapas cercanas a la alimentación son las que presentan mayores valores de μ_s y μ_c , con lo que denotan ser una zona mala para ubicar mediciones de temperatura, y se recomienda no pasar de dos estados innovados.

La medida de singularidad μ_s (que en el marco de estabilidad Entrada-Salida significa la ganancia del error asintótico de estimación) refleja la dependencia del desempeño y estructura del estimador, y es mejor en cierto modo que la medida de mal condicionamiento μ_c , ya que proporciona una idea de la factibilidad de implementación del estimador con una estructura dada.

Las medidas (μ_c^v y λ_v) asociadas con la dinámica no innovada no cambian significativamente en las diversas configuraciones de la estructura (figuras 5.3 y 5.4), por lo que a estabilidad y velocidad de reconstrucción se refiere. Solamente cuando se tiene innovación completa (corrección en todas las etapas) hay una diferencia.

La medida de singularidad en base a la matriz de estimabilidad y en base a la matriz Gramiana lleva al mismo resultado estructural, como se puede apreciar en las figura 5.1 y 5.5.

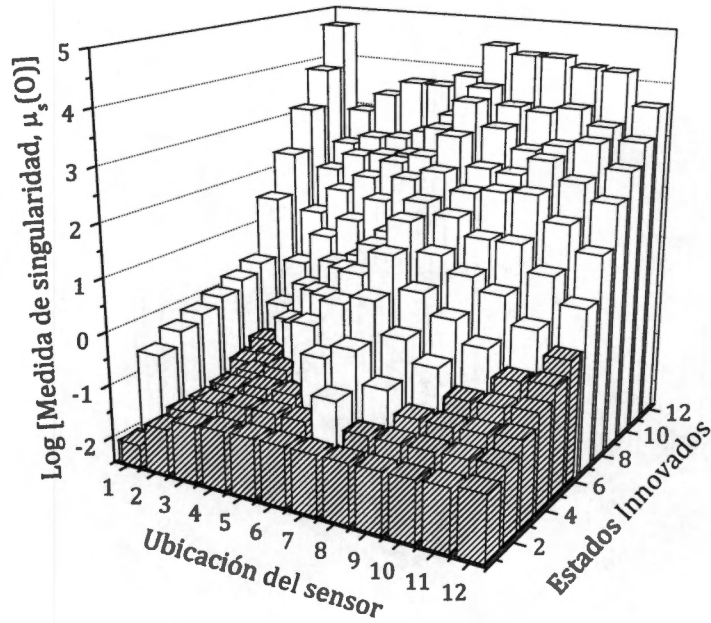


Figura 5.1. Dependencia de la medida de singularidad (μ_s) contra la ubicación del sensor (π_i) y el orden de estimación (κ) usando la matriz de estimación (O), en el $t = 40$ min.

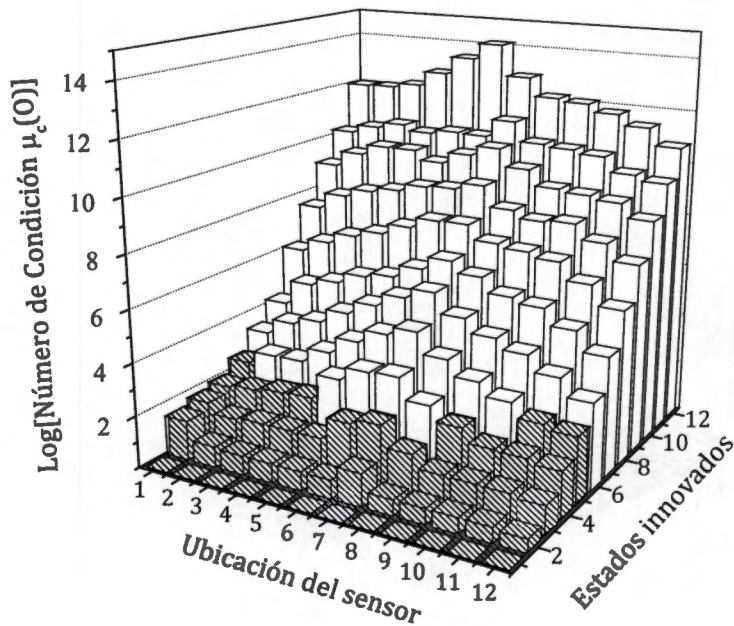


Figura 5.2. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) contra la ubicación del sensor (π_i) y el orden de estimación (κ) usando la matriz de estimación (O), en el $t = 40$ min.

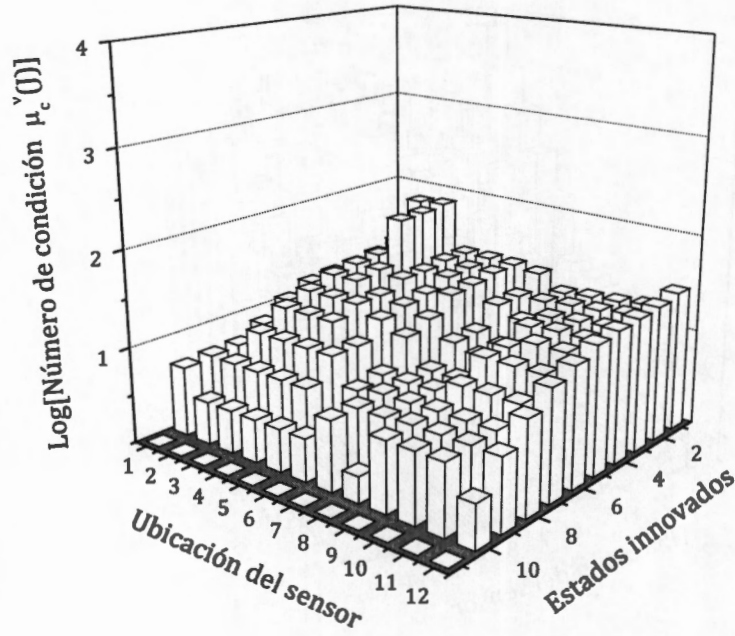


Figura 5.3. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c^{ν}) de la dinámica no innovada contra la ubicación del sensor (π_i) y el orden de estimación (κ) en el $t = 40$ min.

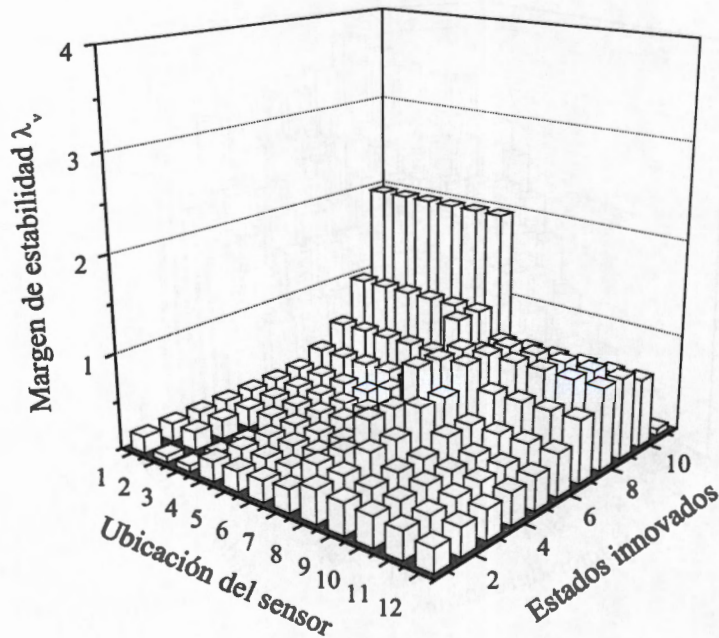


Figura 5.4. Dependencia del margen de estabilidad (λ_w) contra la ubicación del sensor (π_i) y el orden de estimación (κ) en el $t = 40$ min.

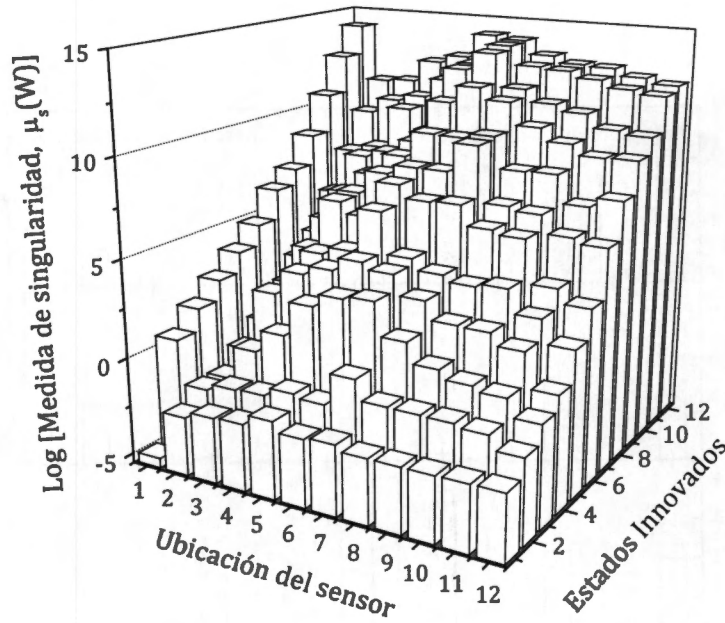


Figura 5.5. Dependencia de la medida de singularidad (μ_s) contra la ubicación del sensor (π_i) y el orden de estimación (κ) usando la matriz Grammiana (W_o), en el $t = 40$ min.

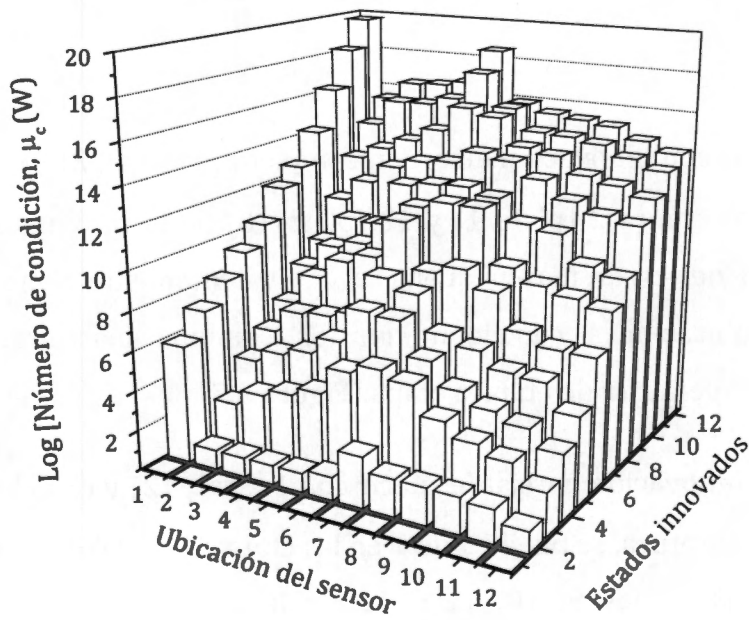


Figura 5.6. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) contra la ubicación del sensor (π_i) y el orden de estimación (κ) usando la matriz Grammiana (W_o), en el $t = 40$ min.

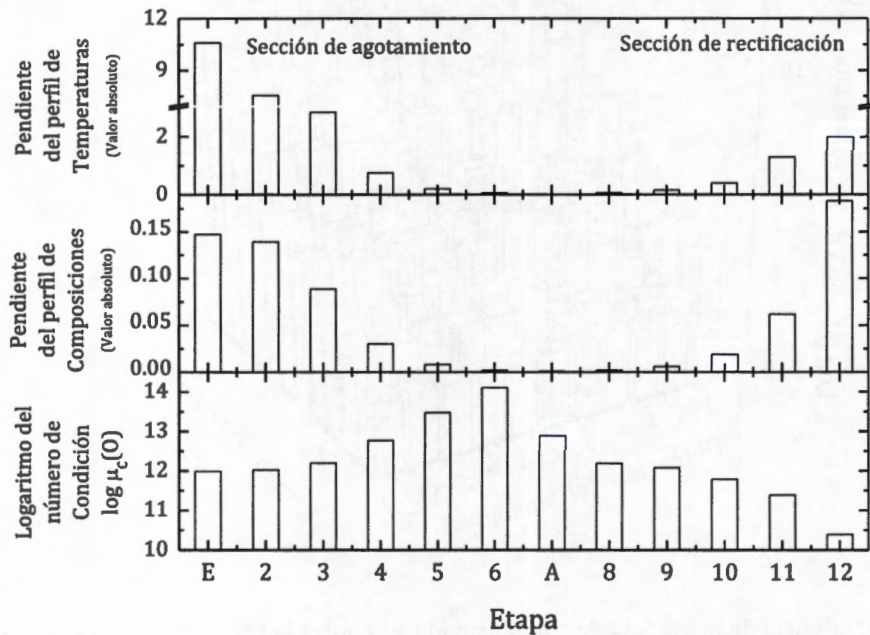


Figura 5.7. Cambio de temperatura y composición entre etapas y su comparación con la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) para un orden de estimación completo ($\kappa = n = 12$) en el $t = 40$ min.

Para las estructuras con innovación de orden completo ($\kappa = n = 12$), las mediciones de temperatura en las etapas 2 (plato 1) y 12 (plato 10) de la columna son los que tiene la propagación del error más pequeña, o equivalentemente tiene la máxima robustez, y estas ubicaciones coinciden con los cambios más grandes en la concentración y la temperatura de etapa a etapa (Figura 5.7).

En estructuras de innovación parcial (es decir con $1 < \kappa < 12$) y con el caso de una sola medición de temperatura, se puede ubicar en las etapas 1, 2, 3 ó 4 de la sección de agotamiento, o en las etapas 9, 10, 11 ó 12 de la sección de rectificación. La comparación de Figuras 5.1 y 5.5 verifica que la consideración deducida de argumentos teóricos de que la medida de singularidad con la matriz de estimación (O) da el mismo resultado estructural que la matriz Gramiana (W_o).

5.3. Estructuras con múltiples mediciones

Continuando con el análisis de la propiedad de estimabilidad de la columna de destilación, con la aplicación de las medidas de detectabilidad descritas en la sección 4.4.1 a nuestro caso de ejemplo con dos mediciones y con estructura completamente observable obtenemos las figuras 5.8 y 5.9.

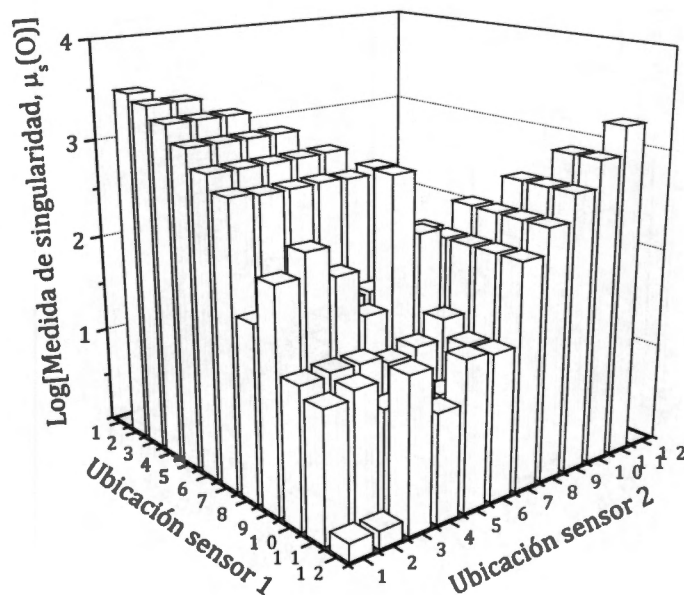


Figura 5.8. Dependencia de la medida de singularidad (μ_s) con la ubicación de dos mediciones ($\pi_i, \pi_j, i \neq j$) y con innovación completa ($\kappa=n$) usando la matriz de estimación (O), en el $t = 40$ min.

En la figura 5.8 se grafican a las dependencias de la medida de singularidad (μ_s) para la situación de dos mediciones con observabilidad completa, es decir con $\kappa = n$. Se tiene que las mejores ubicaciones de mediciones corresponden para el primer sensor en las etapas 1 y 2, y para el segundo sensor en la etapa 12. Lo mismo se observa con la medida de la medida de mal condicionamiento μ_c , como lo muestra la figura 4.15.

Para las estructuras con innovación de orden completo ($\kappa = n = 12$) y con dos mediciones, las mediciones de temperatura en las etapas 2 (plato 1) y 12 (plato 10) (que corresponden a las mejores en forma individual) son las que tienen la propagación del error más pequeña (la máxima robustez), y estas ubicaciones coinciden con los cambios más grandes en la concentración y la temperatura de etapa a etapa. De igual manera se observa que se debe colocar una medición en cada sección de la columna (rectificación y agotamiento).

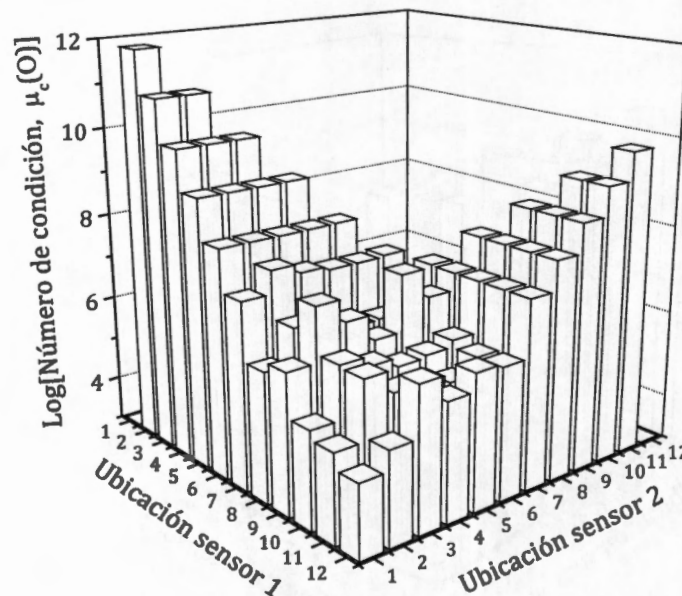


Figura 5.9. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) con la ubicación de dos mediciones ($\pi_i, \pi_j, i \neq j$) y con innovación completa ($\kappa=n$) usando O en el $t = 40$ min.

Tomando las mejores ubicaciones para dos mediciones (etapa 2 y 12), en las siguientes figuras evaluamos las medidas de estimabilidad variando en grado de estimación κ_i para cada medición (figuras 5.10, 5.11 y 5.12). Buscando una mayor una menor propagación de errores (figura 4.16) contra velocidad de reconstrucción (figura 5.10) observamos que es probable obtener buenos resultados en la tarea de estimación con grados de estimación igual o menores de 3 para cada medición.

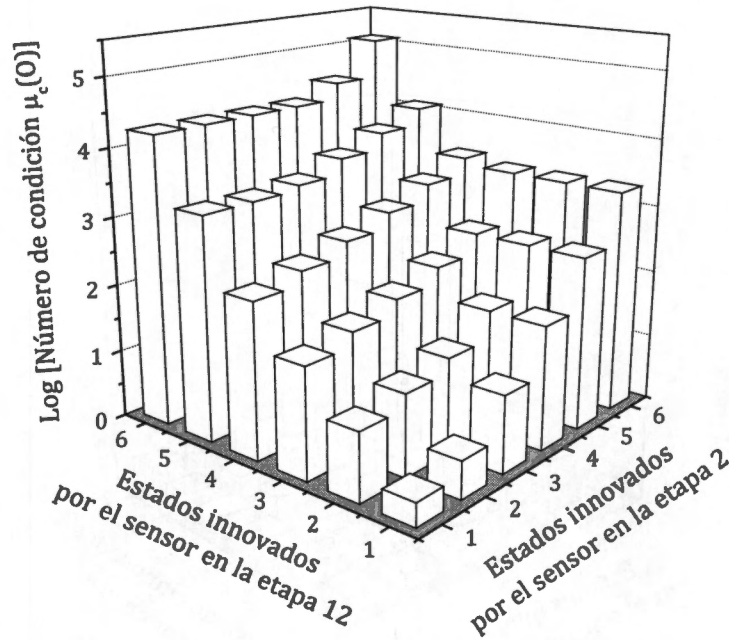


Figura 5.10. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) contra el número de estados innovados (κ_1, κ_2) para dos mediciones en las etapas 2 y 12 usando O en el $t = 40$ min.

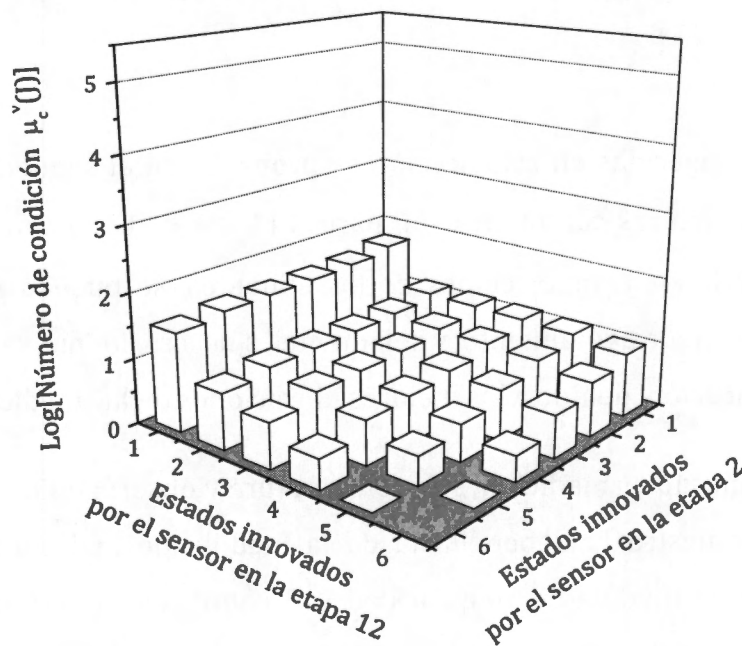


Figura 5.11. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c^v) contra el número de estados innovados (κ_1, κ_2) para dos mediciones en las etapas 2 y 12 en el $t = 40$ min.

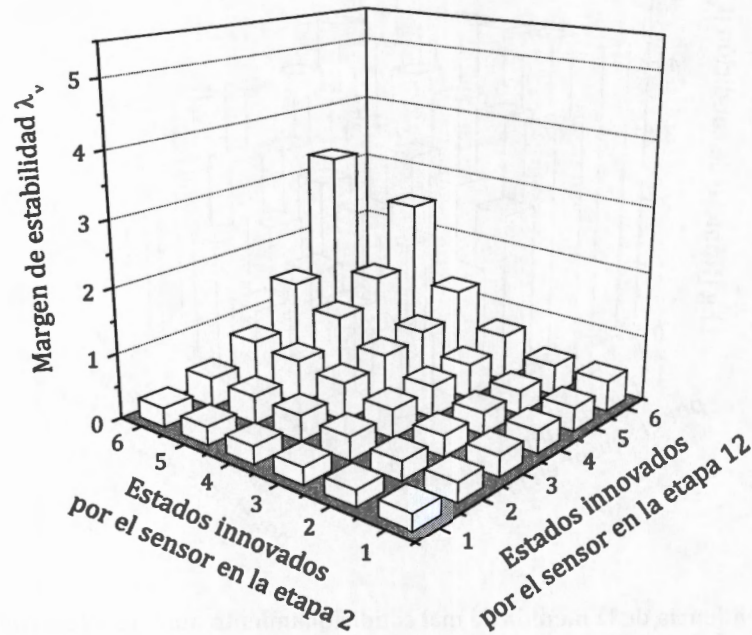


Figura 5.12. Dependencia del margen de estabilidad de la dinámica no innovada (λ_v) contra el número de estados innovados (κ_1, κ_2) para dos mediciones en las etapas 2 y 12 en el $t = 40$ min.

Las estructuras sugeridas en esta sección se probarán en el siguiente capítulo de esta tesis. Para estructuras con innovación parcial ($1 < \kappa < 12$) y con el objetivo de estimación de inferir las composiciones de los efluentes, se pueden innovar 1 ó 2 etapas en de la sección de agotamiento, y solamente es necesario innovar un estado en la sección de rectificación, debido a las mejores ubicaciones de las mediciones.

Para el caso de múltiples mediciones de temperatura y observabilidad completa, en la figura 5.13 se muestra la dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) y de la medida de singularidad (μ_s) contra el número de mediciones óptimamente ubicadas. Las mejores ubicaciones para las mediciones en el sistema experimental son: la etapa 2 para un sensor; las etapas 2 y 12 para 2 sensores; las etapas 2, 8 y 12 para tres sensores; las etapas 2, 6, 8 y 12 para cuatro sensores; y

finalmente, las etapas 2, 4, 6, 8, 10 y 12 para seis sensores. Aquí se ve que hay una mejora considerable cuando se pasa de una estructura con una medición a otra estructura con dos mediciones, y también se ve que no hay mejora significativa cuando se incorporan más mediciones.

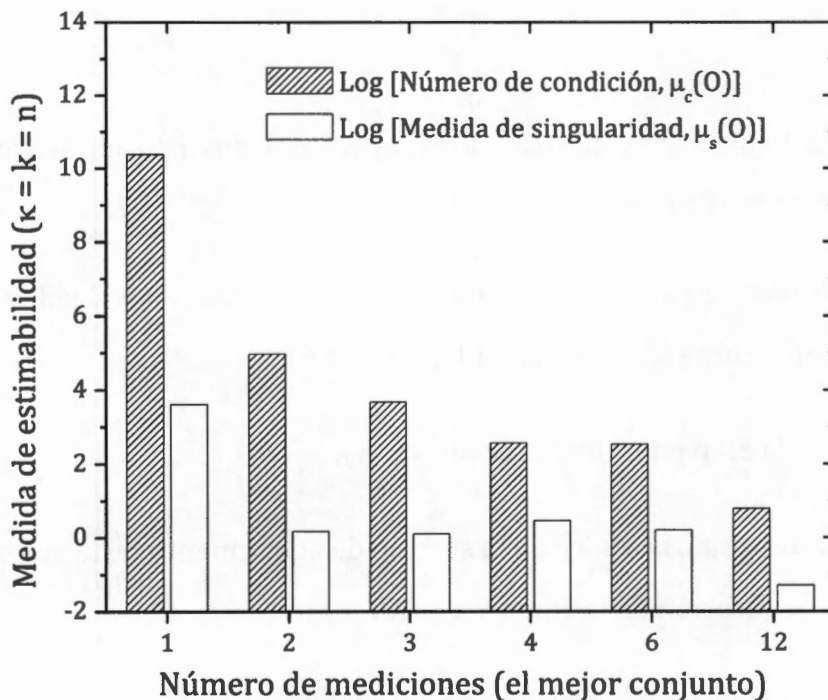


Figura 5.13. Dependencia de la medida de mal condicionamiento numérico (μ_c) y de la medida de singularidad (μ_s) contra el número de mediciones óptimamente ubicadas usando la matriz de estimación (O), en el $t = 40$ min.

5.4 Resultados

Debido a la característica de sistema por etapas de la columna de destilación, la propiedad de monotonía (Sontag, 2000) y de los resultados obtenidos con los análisis estructurales con una o múltiples mediciones obtenemos las siguientes recomendaciones estructurales: (i) probablemente dos mediciones deben ser usadas,

ubicadas una por cada sección de la columna, (ii) en cada sección, la medición de temperatura debe ser localizada en la zona más sensitiva, (iii) es recomendado no usar más de tres estados innovados por medición en la tarea de estimación del perfil completo de composiciones, (iv) la peor ubicación es en el plato de alimentación, y (v) para estimación de una etapa, no hay ninguna restricción en cuanto a la ubicación de la medición.

De manera particular para el sistema experimental descrito en el capítulo dos, tenemos los siguientes resultados:

(i) *Mejores ubicaciones*: en la sección de agotamiento son las etapas 2 y 3 ($\kappa \leq 6$), y en la sección de rectificación son las etapas 11 y 12 ($\kappa \leq 6$).

(ii) *Peor ubicación*: la etapa de alimentación ($\kappa \leq 1$).

(iii) *Ubicaciones intermedias* ($\kappa \leq 3$): en la sección de agotamiento de la etapa 2 a la 5, y en la sección de rectificación de la etapa 9 a la 12.

(iv) Mediciones con un estado innovado ($\kappa = 1$): cualquiera etapa es buena.

(v) Máximo número de estados innovados recomendado por sección: 3 etapas.

Los resultados anteriores nos llevan a las siguientes recomendaciones estructurales:

Perfil completo:

a) Dos mediciones de temperatura en las etapas 2 y 12 con innovación en tres estados por cada medición $\kappa = (3, 3)$. Esta estructura propuesta está conformada por dos módulos innovados (uno por sección) y un módulo no innovado.

b) Cuatro mediciones de temperatura en las etapas 2, 4, 8 y 12 con innovación en un estado por cada medición $\kappa = (1, 1, 1, 1)$. Esta estructura propuesta está conformada por cuatro módulos innovados (dos por sección) y cuatro módulos no innovados.

Efluentes:

a) Dos mediciones de temperatura en las etapas 2 y 12 con innovación en un estado por cada medición $\kappa = (1, 1)$. Esta estructura propuesta está conformada por dos módulos innovados (uno por sección) y dos módulos no innovados.

b) Similar al anterior, pero eliminando el módulo no innovado que incluye a la etapa de alimentación.

... en el momento de la redacción de este artículo, el sistema de gestión de la información de la empresa se encontraba en fase de desarrollo y no se había implementado en su totalidad.

El presente artículo tiene como objetivo principal analizar el impacto de la implementación de un sistema de gestión de la información en la productividad de una empresa. Para ello, se ha realizado un estudio de caso en una empresa que ha implementado recientemente dicho sistema. Los resultados obtenidos muestran que la implementación del sistema ha permitido mejorar la productividad de la empresa, así como también ha permitido reducir los costos operativos.

6. RESULTADOS ESTRUCTURALES

En este capítulo se aborda el *segundo problema* que se resuelve en esta tesis: la determinación de *la mejor estructura de estimación, en el sentido del desempeño del algoritmo*, para un objetivo específico de estimación. Primero implementado los candidatos para perfil completo de la columna o una sección; y después para el caso de los efluentes. Partiendo del conjunto de los candidatos obtenidos en el capítulo anterior, se incluye como grados de libertad a: (i) la elección de modelo o parte de él, (ii) el número de sensores y su ubicación y (iii) el mecanismo de asimilación y transmisión de la información de las mediciones. Los resultados se validan con los experimentos descritos en la primera parte del trabajo de tesis. Además la validez de los resultados estructurales se verifica implementándolos con 2 diferentes algoritmos de estimación (estimador geométrico y filtro extendido de Kalman).

2. RESULTADOS EXPERIMENTALES

En el presente trabajo se han realizado una serie de experimentos para determinar la influencia de la estructura de la red de distribución de la información en el comportamiento de los individuos en un sistema de control de tráfico aéreo. Los experimentos se han dividido en dos grupos: el primero de ellos se ha centrado en el estudio de la influencia de la estructura de la red de distribución de la información en el comportamiento de los individuos en un sistema de control de tráfico aéreo. El segundo grupo de experimentos se ha centrado en el estudio de la influencia de la estructura de la red de distribución de la información en el comportamiento de los individuos en un sistema de control de tráfico aéreo. Los resultados de los experimentos se han dividido en dos grupos: el primero de ellos se ha centrado en el estudio de la influencia de la estructura de la red de distribución de la información en el comportamiento de los individuos en un sistema de control de tráfico aéreo. El segundo grupo de experimentos se ha centrado en el estudio de la influencia de la estructura de la red de distribución de la información en el comportamiento de los individuos en un sistema de control de tráfico aéreo.

6.1 Estimación geométrica

Siguiendo la estrategia que se planteó en el capítulo 4, y teniendo en cuenta que en el capítulo 5 se realizó la primera parte de análisis estructural, dando como resultado un conjunto de estructuras candidatas para un objetivo específico de estimación, en este capítulo se aplica la segunda parte de la estrategia, donde se valoran las estructuras candidatas frente al funcionamiento del estimador geométrico descrito anteriormente (capítulos 2 y 3), para buscar la estructura que tenga mejor desempeño frente al objetivo específico de estimación dado. Además la validez de los resultados estructurales se verifica implementándolos con 2 diferentes algoritmos de estimación (estimador geométrico y filtro extendido de Kalman).

6.1.1 Perfil completo

La aplicación de las medidas de estimabilidad (ecuaciones 4.3, 4.4 y 4.5) en el capítulo anterior nos ha permitido obtener unas estructuras candidatas para ser evaluadas con la implementación de un estimador. A continuación se presentan los resultados comparativos del funcionamiento de los estimadores de acuerdo a su correspondiente objetivo de estimación. Para el objetivo de estimación de determinar el perfil completo de composiciones es necesario usar el modelo completo de la columna de destilación. Sin embargo esto último no impide el usar innovación parcial. Las recomendaciones obtenidas en el capítulo anterior (sección 4.5) nos sugieren usar dos mediciones al menos para la implementación del estimador. El estimador geométrico implementado en la sección 3.2.1 con una medición en la etapa 12 y con innovación completa (estructura descrita en la ecuación 3.20) nos muestra que una medición no es suficiente para inferir correctamente el perfil de composiciones (ver las figura 3.1 y 3.2), aún usando la mejor ubicación.

Otra recomendación es no innovar en mas de tres etapas; esto lo comprobaremos con el desempeño del estimador geométrico, comparando un esquema de estimación con innovación en todas las etapas, contra uno con innovación parcial (hasta 3 estados innovados por medición) y otro con innovación mínima (1 estado innovado por medición). Las siguientes estructuras de estimación con dos mediciones en las etapas 2 y 12 (las mejores mediciones obtenidas en el capítulo 4) y diferentes grados de estimación son usados para ver el efecto del número de estados innovados con modelo completo ($n = 12$) en el desempeño del estimador:

Estructura 1: seis etapas por módulo innovado.

$$\sigma_1 = (\kappa = \{6, 6\}, c_i^1 = \{c_1, \dots, c_6\}', c_i^2 = \{c_7, \dots, c_{12}\}'), \quad y = \{T_2, T_{12}\}' \quad (6.1)$$

donde su correspondiente estimador está dado por:

$$\dot{\hat{c}}_i^1 = f_i^1(\hat{c}_i^1, \hat{c}_7, u) + O_1^{-1}(\hat{c}_i^1, \hat{c}_7, u) \{ \pi_1 \dot{i}_1 + k_{y^1}(y_1 - \beta(\hat{c}_2)) \}, \quad \dot{i}_1 = \omega^7 [y_1 - \beta(\hat{c}_2)]$$

$$\dot{\hat{c}}_i^2 = f_i^2(\hat{c}_6, \hat{c}_i^2, u) + O_2^{-1}(\hat{c}_6, \hat{c}_i^2, u) \{ \pi_2 \dot{i}_2 + k_{y^2}(y_2 - \beta(\hat{c}_{12})) \}, \quad \dot{i}_2 = \omega^7 [y_2 - \beta(\hat{c}_{12})]$$

donde:

$$O_1(\hat{c}_i^1, \hat{c}_7, u) = \beta'(\hat{c}_2) [e_2', e_2' \mathcal{A}_1(\hat{c}, u)', \dots, e_2' \mathcal{A}_1^5(\hat{c}, u)']', \quad e_2 = (0, 1, 0, 0, 0, 0)$$

$$O_2(\hat{c}_6, \hat{c}_i^2, u) = \beta'(\hat{c}_{12}) [e_6', e_6' \mathcal{A}_2(\hat{c}, u)', \dots, e_6' \mathcal{A}_2^5(\hat{c}, u)']', \quad e_6 = (0, 0, 0, 0, 0, 1)$$

$$\mathcal{A}_i(\hat{c}, u) = \partial f_i^i(\hat{c}, u) / \partial c_i^i, \quad \beta'(\hat{c}) = \partial \beta(\hat{c}) / \partial \hat{c}, \quad \pi_i = (0, 0, 0, 0, 0, 1)$$

$$K_{y^j} = (k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6)' = [(6\zeta+1)\omega, (12\zeta^2+6\zeta+3)\omega^2, (8\zeta^3+12\zeta^2+12\zeta+3)\omega^3, \\ (8\zeta^3+12\zeta^2+12\zeta+3)\omega^4, (12\zeta^2+6\zeta+3)\omega^5, (6\zeta+1)\omega^6]'$$

Estructura 2: tres etapas por módulo innovado y un módulo no innovado.

$$\sigma_2 = (\kappa = \{3, 3\}, c_1^1 = \{c_1, c_2, c_3\}', c_1^2 = \{c_{10}, c_{11}, c_{12}\}', c_v^1 = \{c_4, \dots, c_9\}'), y = \{T_2, T_{12}\}' \quad (6.2)$$

cuyo estimador está dado por:

$$\dot{\hat{c}}_1^1 = f_1^1(\hat{c}_1^1, \hat{c}_4, u) + O_1^{-1}(\hat{c}_1^1, \hat{c}_4, u) \{ \pi_1 \hat{i}_1 + k_y^1 (y_1 - \beta(\hat{c}_2)) \}, \quad \hat{i}_1 = \omega^4 [y_1 - \beta(\hat{c}_2)]$$

$$\dot{\hat{c}}_v^1 = f_1(\hat{c}_3, \hat{c}_v^1, \hat{c}_{10}, u)$$

$$\dot{\hat{c}}_1^2 = f_1^2(\hat{c}_9, \hat{c}_1^2, u) + O_2^{-1}(\hat{c}_9, \hat{c}_1^2, u) \{ \pi_2 \hat{i}_2 + k_y^2 (y_2 - \beta(\hat{c}_{12})) \}, \quad \hat{i}_2 = \omega^4 [y_2 - \beta(\hat{c}_{12})]$$

donde:

$$O_1(\hat{c}_1^1, \hat{c}_4, u) = \beta'(\hat{c}_2) [e_2', e_2 \mathcal{A}_1(\hat{c}, u)', e_2 \mathcal{A}_1^2(\hat{c}, u)']', \quad e_2 = (0, 1, 0) \quad \pi_1 = (0, 0, 1)$$

$$O_2(\hat{c}_9, \hat{c}_1^2, u) = \beta'(\hat{c}_{12}) [e_3', e_3 \mathcal{A}_2(\hat{c}, u)', e_3 \mathcal{A}_2^2(\hat{c}, u)']', \quad e_3 = (0, 0, 1)$$

$$\mathcal{A}_i(\hat{c}, u) = \partial f_i(\hat{c}, u) / \partial c_i, \quad \beta'(\hat{c}) = \partial \beta(\hat{c}) / \partial \hat{c}, \quad K_y^j = (k_1, k_2, k_3)' = [4\zeta\omega, (4\zeta+2)\omega^2, 4\zeta\omega^3]'$$

Estructura 3: una etapa por módulo innovado y dos módulos no innovados

$$\sigma_3 = (\kappa = \{1, 1\}, c_1^1 = \{c_2\}, c_1^2 = \{c_{12}\}, c_v^1 = \{c_1\}, c_v^2 = \{c_3, \dots, c_{11}\}'), y = \{T_2, T_{12}\}' \quad (6.3)$$

cuyo estimador está dado por:

$$\dot{\hat{c}}_1 = f_1(\hat{c}_1, \hat{c}_2, u)$$

$$\dot{\hat{c}}_2 = f_2(\hat{c}_1, \hat{c}_2, \hat{c}_3, u) + 1/\beta'(\hat{c}_2) \{ \hat{i}_1 + 2\zeta\omega(y_1 - \beta(\hat{c}_2)) \}, \quad \hat{i}_1 = \omega^2 [y_1 - \beta(\hat{c}_2)]$$

$$\dot{\hat{c}}_v^2 = f_v^2(\hat{c}_2, \hat{c}_v^2, \hat{c}_{12}, u)$$

$$\dot{\hat{c}}_{12} = f_{12}(\hat{c}_{11}, \hat{c}_{12}, u) + 1/\beta'(\hat{c}_{12}) \{ \hat{i}_2 + 2\zeta\omega(y_2 - \beta(\hat{c}_{12})) \}, \quad \hat{i}_2 = \omega^2 [y_2 - \beta(\hat{c}_{12})]$$

donde $\beta'(\hat{c}) = \partial \beta(\hat{c}) / \partial \hat{c}$.

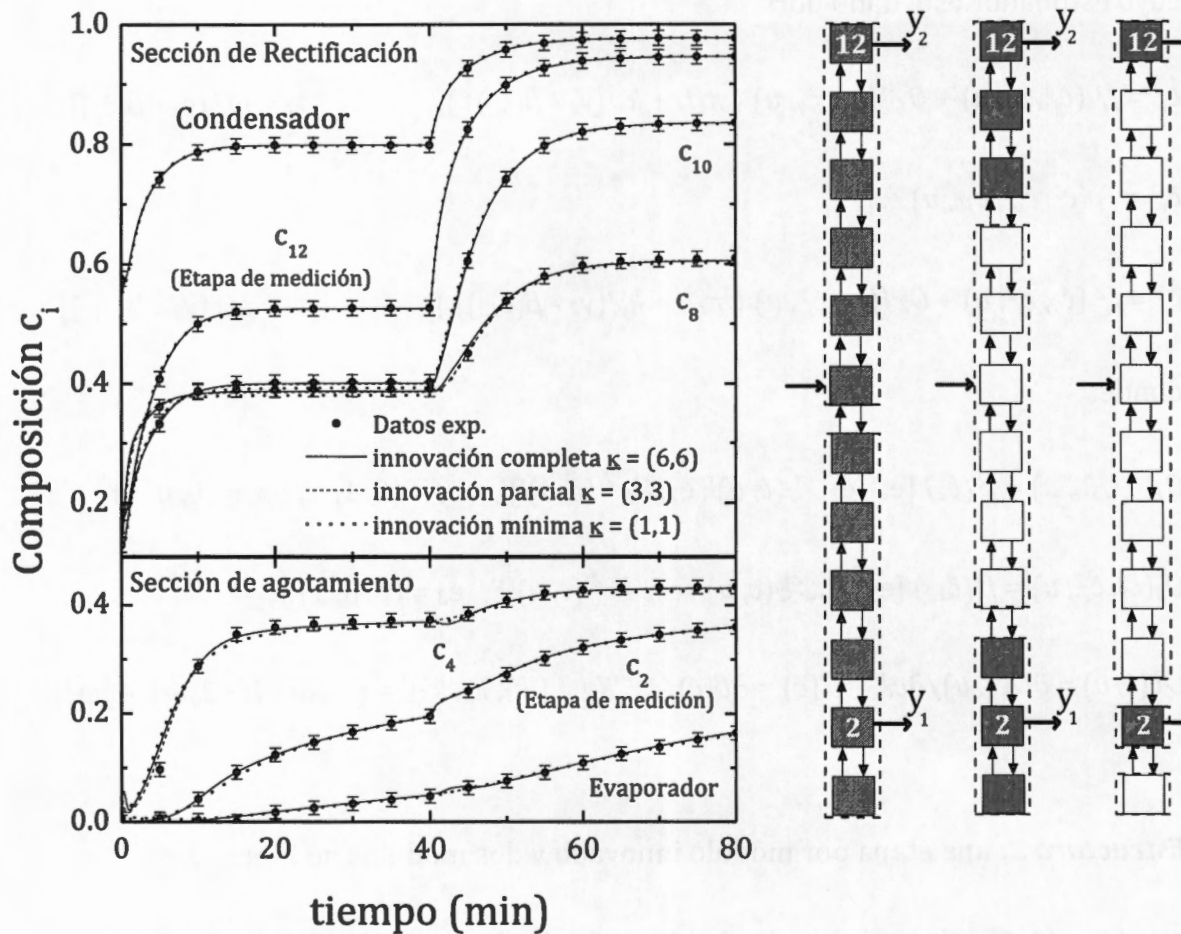


Figura 6.1. Estimación de perfil de composiciones con el estimador geométrico (EG) para tres estructuras de estimación (ecuaciones 6.1, 6.2 y 6.3) usando dos mediciones (etapas 2 y 12) y el modelo completo de la columna.

La estructura descrita por la ecuación 6.1 está formada de dos módulos con innovación completa, desacoplados e interconectados por los balances de materia. La estructura de la ecuación 6.2 está formada de dos módulos innovados de tres etapas, unidos por un módulo no innovado de seis etapas. La última estructura (ecuación 6.3) tiene dos módulos innovados de una etapa y dos no innovados, uno de una etapa y

otro de nueve etapas. Para un valor de $\zeta = 2^{1/2}$, las guías de sintonía del estimador nos lleva a un valor de $n_\omega = 8$, y el comportamiento del estimador geométrico (EG) con las tres estructuras descritas anteriormente es mostrado en las figuras 6.1 y 6.2.

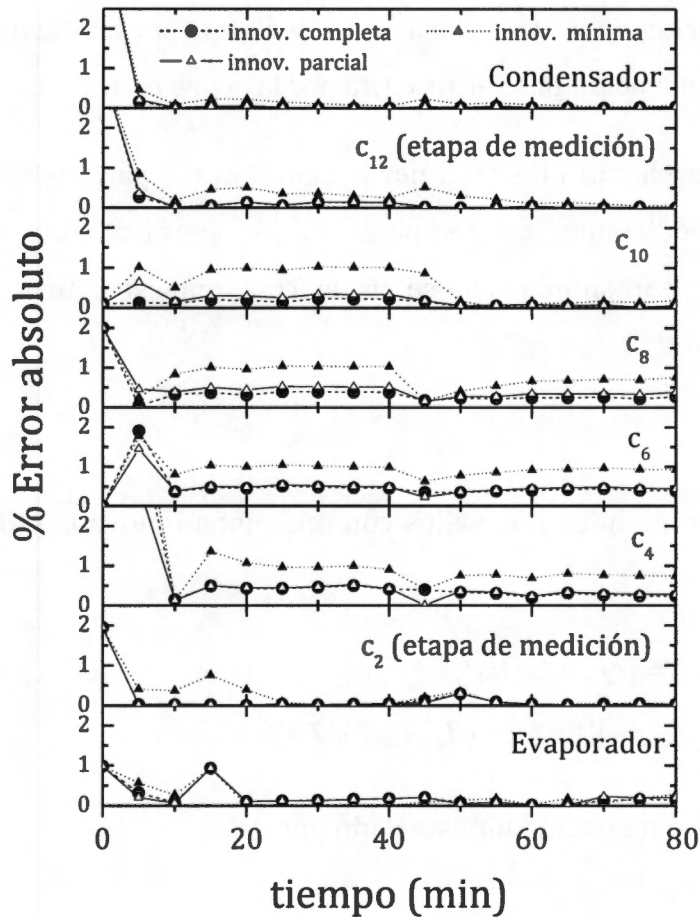


Figura 6.2. Error de estimación para la inferencia del perfil de composiciones con el estimador geométrico (EG) para tres estructuras de estimación (ecuaciones 6.1, 6.2 y 6.3) usando dos mediciones (etapas 2 y 12) y el modelo completo de la columna.

En la figura 6.1 se observa que no es necesario innovar en todas las etapas, para inferir el perfil completo de composiciones con un buen desempeño. El esquema de innovación parcial con tres etapas innovadas por medición (ecuación 6.2) tiene un desempeño idéntico al de la estructura con innovación en todas las etapas (ecuación

6.1). Además de la estructura con innovación parcial permite una sintonía más rápida ($n_\omega = 12$) y resulta ser más robusta ante errores de operación y errores en parámetros de operación y termodinámicos. La estructura con innovación mínima (ecuación 6.3) no fue suficiente para la tarea de estimación de inferir adecuadamente el perfil completo de composiciones en la columna. Es por las razones anteriores que la mejor estructura de estimación de las tres estructuras descritas por las ecuaciones 6.1, 6.2 y 6.3, es la que tiene innovación parcial, descrita por la ecuación 6.2.

Consideremos la estructura descrita por la ecuación 6.4 para determinar el efecto de agregar más mediciones de temperatura. Se agregan dos mediciones de temperatura más, y por simplicidad se inicia con una estructura con una etapa innovada por medición:

Estructura 4: cuatro módulos innovados con una etapa innovada y dos módulos no innovados

$$\sigma_4 = (\kappa = \{1, 1, 1, 1\}, c_i^1 = \{c_2\}, c_i^2 = \{c_6\}, c_i^3 = \{c_8\}, c_i^4 = \{c_{12}\}, c_v^1 = \{c_1\}, c_v^2 = \{c_3, c_4, c_5\}', c_v^3 = \{c_7\}, c_v^4 = \{c_9, c_{10}, c_{11}\}'), \quad y = (T_2, T_6, T_8, T_{12})', \quad (6.4)$$

donde su correspondiente estimador está dado por:

$$\dot{\hat{c}}_1 = f_1(\hat{c}_1, \hat{c}_2, u)$$

$$\dot{\hat{c}}_2 = f_2(\hat{c}_1, \hat{c}_2, \hat{c}_3, u) + 1/\beta'(\hat{c}_2)\{l_1 + 2\zeta\omega(y_1 - \beta(\hat{c}_2))\}, \quad \dot{i}_1 = \omega^2[y_1 - \beta(\hat{c}_2)]$$

$$\dot{\hat{c}}_v^2 = f_v^2(\hat{c}_3, \hat{c}_v^2, \hat{c}_6, u)$$

$$\dot{\hat{c}}_6 = f_6(\hat{c}_5, \hat{c}_6, \hat{c}_7, u) + 1/\beta'(\hat{c}_6)\{l_2 + 2\zeta\omega(y_2 - \beta(\hat{c}_6))\}, \quad \dot{i}_2 = \omega^2[y_2 - \beta(\hat{c}_6)]$$

$$\dot{\hat{c}}_7 = f_7(\hat{c}_6, \hat{c}_7, \hat{c}_8, u)$$

$$\dot{\hat{c}}_8 = f_8(\hat{c}_7, \hat{c}_8, \hat{c}_9, u) + 1/\beta'(\hat{c}_8)\{l_3 + 2\zeta\omega(y_3 - \beta(\hat{c}_8))\}, \quad \dot{i}_3 = \omega^2[y_3 - \beta(\hat{c}_8)]$$

$$\dot{\hat{c}}_v^4 = f_v^4(\hat{c}_v^4, u)$$

$$\dot{c}_{12} = f_{12}(\hat{c}_{11}, \hat{c}_{12}, u) + 1/\beta'(\hat{c}_{12})\{i_4 + 2\zeta\omega(y_4 - \beta(\hat{c}_{12}))\},$$

$$\dot{i}_4 = \omega^2[y_4 - \beta(\hat{c}_4)]$$

donde $\beta'(\hat{c}) = \partial\beta(\hat{c})/\partial\hat{c}$.

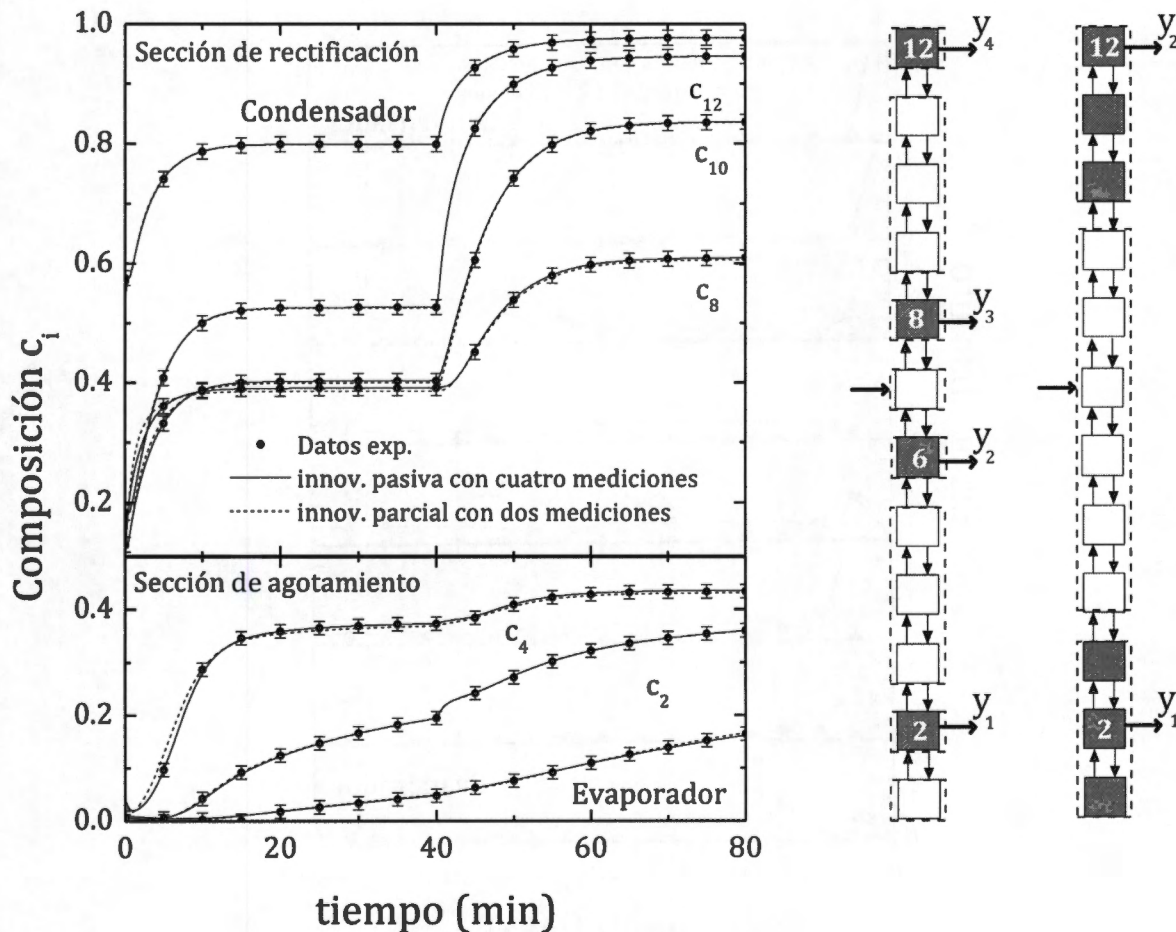


Figura 6.3. Estimación de perfil de composiciones con el estimador geométrico (EG) para dos estructuras de estimación: a) con innovación mínima y usando cuatro mediciones (etapas 2, 6, 8 y 12); y b) con innovación parcial con dos mediciones (etapas 2 y 12) e innovando en tres etapas por cada medición.

La estructura descrita por la ecuación 6.4 está formada por cuatro módulos innovados de una etapa cada uno y cuatro módulos no innovados, dos de tres etapas y dos de una etapa. En las figuras 6.3 y 6.4 se aprecia que usando la estructura de

estimación usando cuatro mediciones (etapas 2, 6, 8 y 12), innovando en una etapa por medición y usando el modelo completo, se logra una mejor reconstrucción del perfil de composiciones que usando la mejor estructura con dos mediciones (ecuación 6.2).

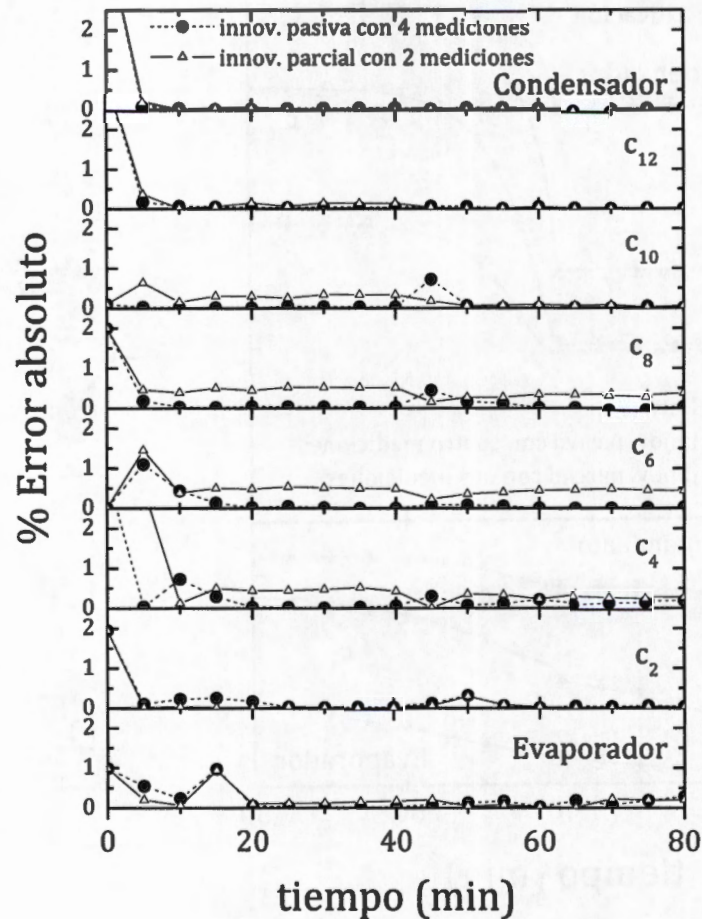


Figura 6.4. Error de estimación para la inferencia del perfil de composiciones con el estimador geométrico para dos estructuras: a) con innovación mínima y usando cuatro mediciones (etapas 2, 6, 8 y 12); y b) con innovación parcial con dos mediciones (etapas 2 y 12) e innovando en tres etapas por cada medición.

Además de que la estructura con innovación en una etapa por medición permite una sintonía más rápida ($n_w = 15$), resulta ser más robusta ante errores de operación y

errores en parámetros de operación y termodinámicos. Cuando se considera una estructura de cuatro mediciones y dos etapas innovadas por medición, no se logra ninguna mejoría en el desempeño del estimador, comparando con la estructura que tiene una innovación en una etapa por medición y usando cuatro mediciones (ecuación 6.4).

En la sección 5.4 del capítulo anterior, se encuentra que la etapa de alimentación es la peor ubicación para una medición. Para mostrar que una medición cerca de la alimentación no es adecuada, se tomó a la etapa seis (una etapa debajo de la alimentación) para ubicar un medición de temperatura. Por simplicidad se inició con una estructura con una etapa innovada por la medición:

Estructura 5:

$$\sigma_5 = (\kappa = \{1\}, c_v^1 = \{c_6\}, c_v^2 = \{c_1, \dots, c_5\}', c_v^3 = \{c_8, \dots, c_{12}\}'), y = (T_6), n = 12 \quad (6.5)$$

cuyo estimador está dado por:

$$\dot{\hat{c}}_v^1 = f_v^1(\hat{c}_v^1, \hat{c}_6, u)$$

$$\dot{\hat{c}}_6 = f_6(\hat{c}_5, \hat{c}_6, \hat{c}_7, u) + 1/\beta'(\hat{c}_6)\{ \hat{i}_1 + 2\zeta\omega(y_1 - \beta(\hat{c}_6)) \}, \quad \hat{i}_1 = \omega^2 [y_1 - \beta(\hat{c}_6)]$$

$$\dot{\hat{c}}_v^2 = f_v^2(\hat{c}_6, \hat{c}_v^2, u)$$

donde $\beta'(\hat{c}) = \partial\beta(\hat{c})/\partial\hat{c}$.

La estructura está formada por un módulo innovado de una etapa y dos módulos no innovados, uno de cinco etapas y otro de seis. La implementación del estimador se muestra en las figuras 6.5 y 6.6.

Se observa que corrige correctamente a la etapa medida como es de esperarse, pero tiene una corrección mínima en las demás etapas en comparación con el modelo a lazo

abierto (figura 2.6). Prácticamente las correcciones en la sección de agotamiento son pequeñas y en la sección de rectificación son mínimas.

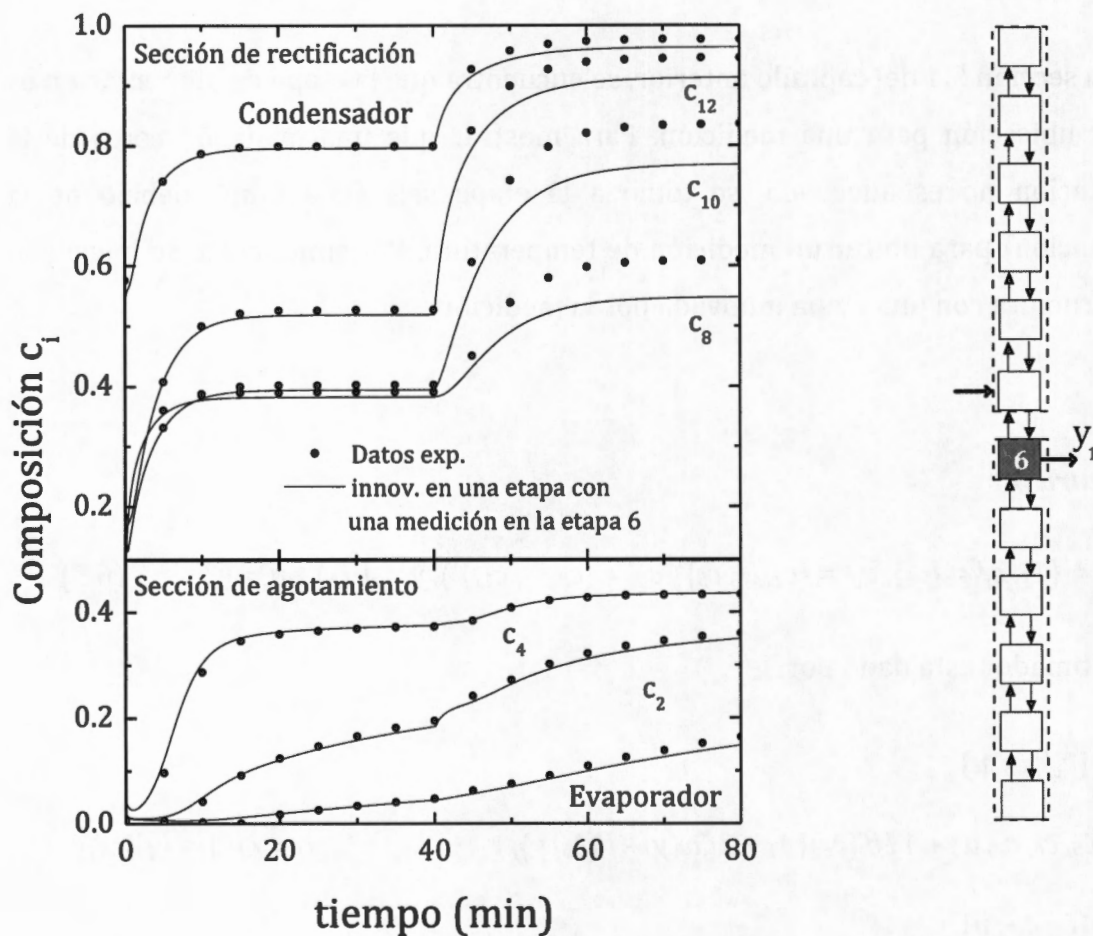


Figura 6.5. Estimación de perfil de composiciones con el estimador geométrico (EG) para la peor estructura de estimación: innovando en una etapa y usando una medición en la etapa 6.

Cuando se trata de innovar a más composiciones con la medición ubicada en la etapa seis, no se encontró una sintonía ($n_w > 1$) que permita hacer más rápido el estimador que la dinámica natural de la columna de destilación a lazo abierto. Esto

concuenda con los resultados sugerentes encontrados en el capítulo anterior, de no innovar más de una etapa en la zona de alimentación. Esta etapa es también la que tiene los menores cambios en composición y temperatura en la trayectoria experimental.

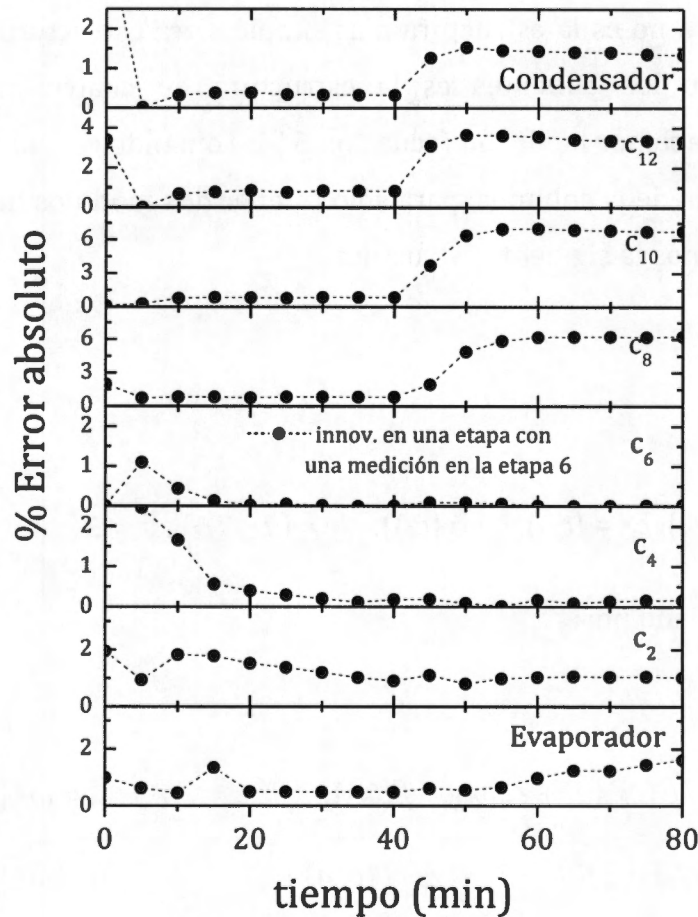


Figura 6.6. Error de estimación para la inferencia del perfil de composiciones con el estimador geométrico (EG) para la peor estructura de estimación: innovando en una etapa y usando una medición en la etapa 6.

6.1.2 Efluentes

Hasta este punto se han implementado los estimadores con modelo completo debido al objetivo de estimación de inferir el perfil de composiciones. Cuando el

objetivo es inferir la composición de los efluentes, entra en juego la selección del modelo. En la sección 3.3 de esta tesis se muestra el desempeño del estimador geométrico para modelo truncado e innovación parcial. En las figuras 3.11 y 3.12 se observa que con un modelo truncado e innovación completa se logra inferir correctamente las composiciones de los efluentes. La estructura descrita por las ecuaciones 3.25 y 3.26 está formada por dos módulos innovados de tres etapas cada uno. Sin embargo esta no es la estructura más simple. Otra estructura que tiene una buena predicción de los efluentes es la estructura de cuatro mediciones con innovación en una etapa por medición (ecuación 6.5). Tomando esta última estructura y truncando el modelo de la columna, para sólo retener dos módulos innovados y uno no innovado, obtenemos la siguiente estructura:

Estructura 6:

$$\sigma_6 = (\kappa = \{1,1\}, c_1^1 = \{c_2\}, c_1^2 = \{c_{12}\}, c_v^1 = \{c_1\}), \quad y = (T_2, T_{12})', \quad n = 3 \quad (6.6)$$

cuyo estimador está dado por:

$$\hat{c}_1 = f_1(\hat{c}_1, \hat{c}_2, u)$$

$$\hat{c}_2 = f_2(\hat{c}_1, \hat{c}_2, \bar{c}_3, u) + 1/\beta'(\hat{c}_2)\{l_1 + 2\zeta\omega(y_1 - \beta(\hat{c}_2))\}, \quad \dot{i}_1 = \omega^2 [y_1 - \beta(\hat{c}_2)]$$

$$\hat{c}_{12} = f_{12}(\bar{c}_{11}, \hat{c}_{12}, u) + 1/\beta'(\hat{c}_{12})\{l_2 + 2\zeta\omega(y_2 - \beta(\hat{c}_{12}))\}, \quad \dot{i}_2 = \omega^2 [y_2 - \beta(\hat{c}_{12})]$$

donde $\beta'(\hat{c}_i) = \partial\beta(\hat{c}_i)/\hat{c}_i$.

Para un valor de $\zeta = 3/2$, las guías de sintonía del estimador nos lleva a un valor de $n_\omega = 15$, y el comportamiento del estimador con la estructura descrita anteriormente es mostrado en las figuras 6.7 y 6.8.

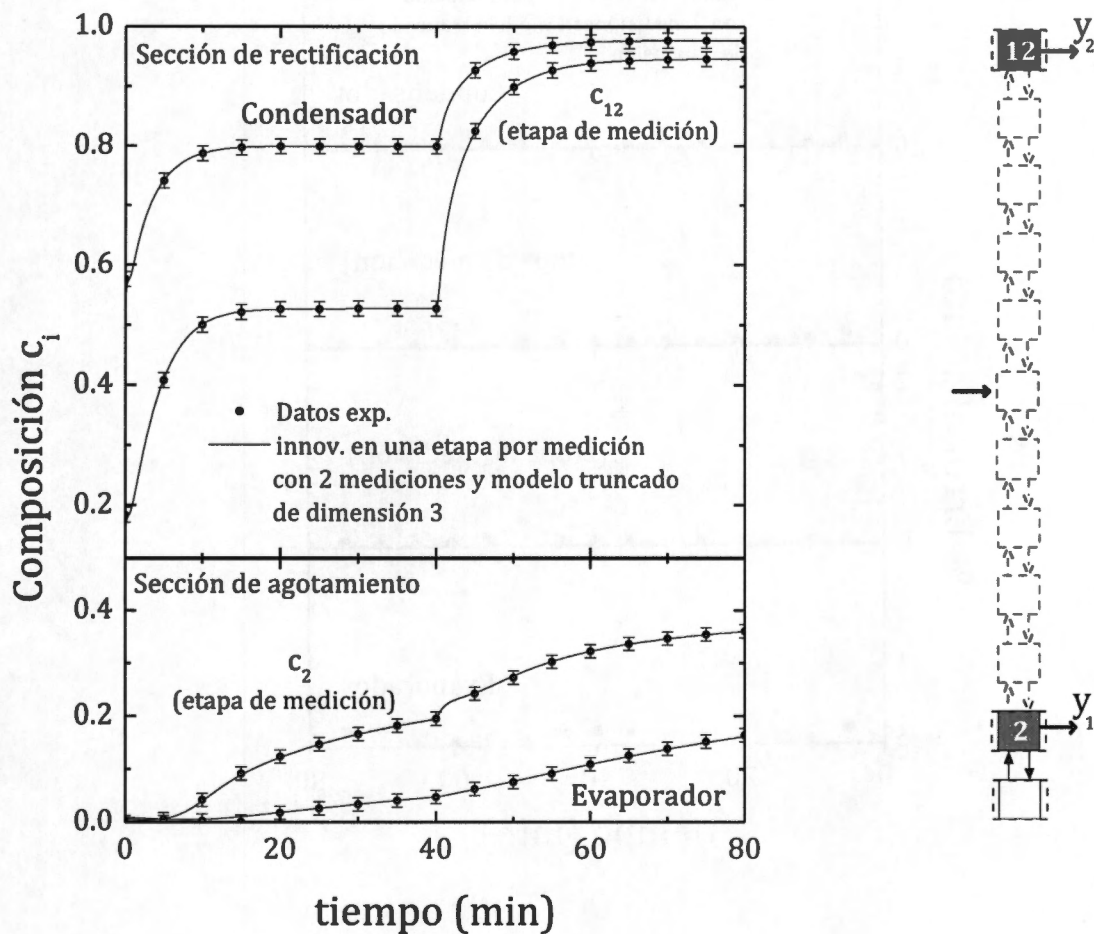


Figura 6.7. Estimación de las composiciones de los efluentes con el estimador geométrico (EG) para una estructuras de estimación con innovación en una etapa por medición y usando dos mediciones (etapas 2 y 12) con un modelo truncado de dimensión 3.

La estructura descrita por la ecuación 6.6 es la estructura más simple que permite estimar correctamente las composiciones de los efluentes, y de igual manera es un esquema muy robusto por su bajo orden de estimación. La estructura está hecha de dos subsistemas desacoplados observables de una y dos etapas respectivamente.

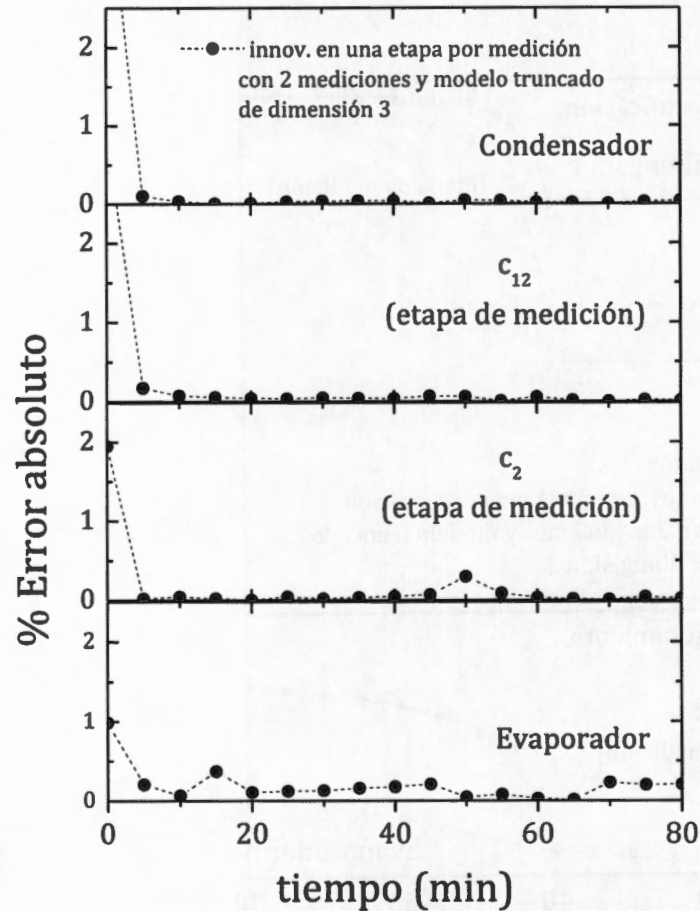


Figura 6.8. Error de estimación para la inferencia de las composiciones en los efluentes con el estimador geométrico (EG) para una estructuras de estimación con innovación en una etapa por medición y un modelo truncado de dimensión 3.

El módulo de la sección de agotamiento está formado por dos módulos, uno innovado donde está la etapa más sensitiva y uno no innovado que conecta a la etapa que se desea inferir con el módulo innovado (figura 6.7). El estimador está formado por tres ecuaciones diferenciales por las composiciones y dos por las acciones integrales.

Cuando el objetivo de estimación es sólo inferir un efluente, se toman los módulos de cada sección de manera independiente y se descartan los de la otra sección:

$$\sigma_7 = (\kappa = \{1\}, c_i^1 = \{c_2\}, c_v^1 = \{c_1\}), \quad y = \{\beta(c_2)\}, \quad n = 2 \quad (6.7)$$

$$\sigma_8 = (\kappa = \{1\}, c_i^1 = \{c_{12}\}), \quad y = \{\beta(c_{12})\}, \quad n = 1 \quad (6.8)$$

Los resultados de para inferir un solo efluente son iguales a su correspondiente sección (rectificación o agotamiento) en el resultado de la estructura descrita por la ecuación 6.4.

6.2 Estimación con filtro extendido de Kalman

Hasta este punto se han implementado las estructuras candidatas obtenidas en el capítulo anterior con el estimador geométrico. Para probar que el conjunto de estructuras candidatas son un resultado estructural que no depende del algoritmo de estimación, se implementara la mejor estructura obtenida para el objetivo de estimar el perfil completo de composiciones con el filtro extendido de Kalman. Se toma el objetivo de inferir el perfil completo de composiciones porque es el que mayores requerimientos tiene con respecto al modelo y las mediciones.

La estructura con la que se implementa el filtro extendido de Kalman es la siguiente:

Estructura 9:

$$\sigma_9 = (\kappa = \{1, 1, 1, 1\}, c_i^1 = \{c_2\}, c_i^2 = \{c_6\}, c_i^3 = \{c_8\}, c_i^4 = \{c_{12}\}, c_v^1 = \{c_1\}, c_v^2 = \{c_3, c_4, c_5\}', c_v^3 = \{c_7\}, c_v^4 = \{c_9, c_{10}, c_{11}\}'), \quad y = (T_2, T_6, T_8, T_{12})', \quad n = 12 \quad (6.9)$$

con el FEKC por módulos, el estimador correspondiente está dado por:

$$\dot{\hat{c}}_1 = f_1 (\hat{c}_1, \hat{c}_2, u)$$

$$\dot{\hat{c}}_2 = f_2 (\hat{c}_1, \hat{c}_2, \hat{c}_3, u) + \{ P_1 \beta'(\hat{c}_2)/r \} \{ y_1 - \beta(\hat{c}_2) \}, \quad \dot{P}_1 = 2 P_1 f_2' + r \omega^4 - \{ P_1 \beta'(\hat{c}_2) \}^2 / r$$

$$\dot{\hat{c}}_v^2 = f_v^2 (\hat{c}_2, \hat{c}_v^2, \hat{c}_6, u)$$

$$\dot{\hat{c}}_6 = f_6 (\hat{c}_5, \hat{c}_6, \hat{c}_7, u) + \{ P_2 \beta'(\hat{c}_6)/r \} \{ y_2 - \beta(\hat{c}_6) \}, \quad \dot{P}_2 = 2 P_2 f_6' + r \omega^4 - \{ P_2 \beta'(\hat{c}_6) \}^2 / r$$

$$\dot{\hat{c}}_7 = f_7 (\hat{c}_6, \hat{c}_7, \hat{c}_8, u)$$

$$\dot{\hat{c}}_8 = f_8 (\hat{c}_7, \hat{c}_8, \hat{c}_9, u) + \{ P_3 \beta'(\hat{c}_8)/r \} \{ y_3 - \beta(\hat{c}_8) \}, \quad \dot{P}_3 = 2 P_3 f_8' + r \omega^4 - \{ P_3 \beta'(\hat{c}_8) \}^2 / r$$

$$\dot{\hat{c}}_v^4 = f_v^4 (\hat{c}_8, \hat{c}_v^4, \hat{c}_{12}, u)$$

$$\dot{\hat{c}}_{12} = f_{12} (\hat{c}_{11}, \hat{c}_{12}, u) + \{ P_4 \beta'(\hat{c}_{12})/r \} \{ y_4 - \beta(\hat{c}_{12}) \}, \quad \dot{P}_4 = 2 P_4 f_{12}' + r \omega^4 - \{ P_4 \beta'(\hat{c}_{12}) \}^2 / r$$

donde $\beta'(\hat{c}_i) = \partial \beta(\hat{c}_i) / \partial \hat{c}_i$, y $f_i'(\hat{c}_i) = f_i(\hat{c}_i) / \partial \hat{c}_i$.

El estimador está formado por doce ecuaciones diferenciales para las composiciones y cuatro ecuaciones adicionales por las ecuaciones de Riccati. La dimensión de filtro extendido de Kalman es la misma que la del estimador geométrico con la misma estructura. En la figura 6.9 y 6.10 se muestra el desempeño del filtro extendido de Kalman y su comparación con el estimador geométrico para la estructura descrita por la ecuación 6.9.

La estructura descrita por la expresión anterior está formada por cuatro módulos innovados de una etapa cada uno y cuatro módulos no innovados, dos de tres etapas y dos de una etapa. Los parámetros de sintonía de ambos estimadores fueron obtenidos de acuerdo a las ecuaciones 3.18 y 3.19 de la sección 3.1.4 de esta tesis, y se fijaron 15 más rápidos que la dinámica natural del proceso ($n_\omega = 15$).

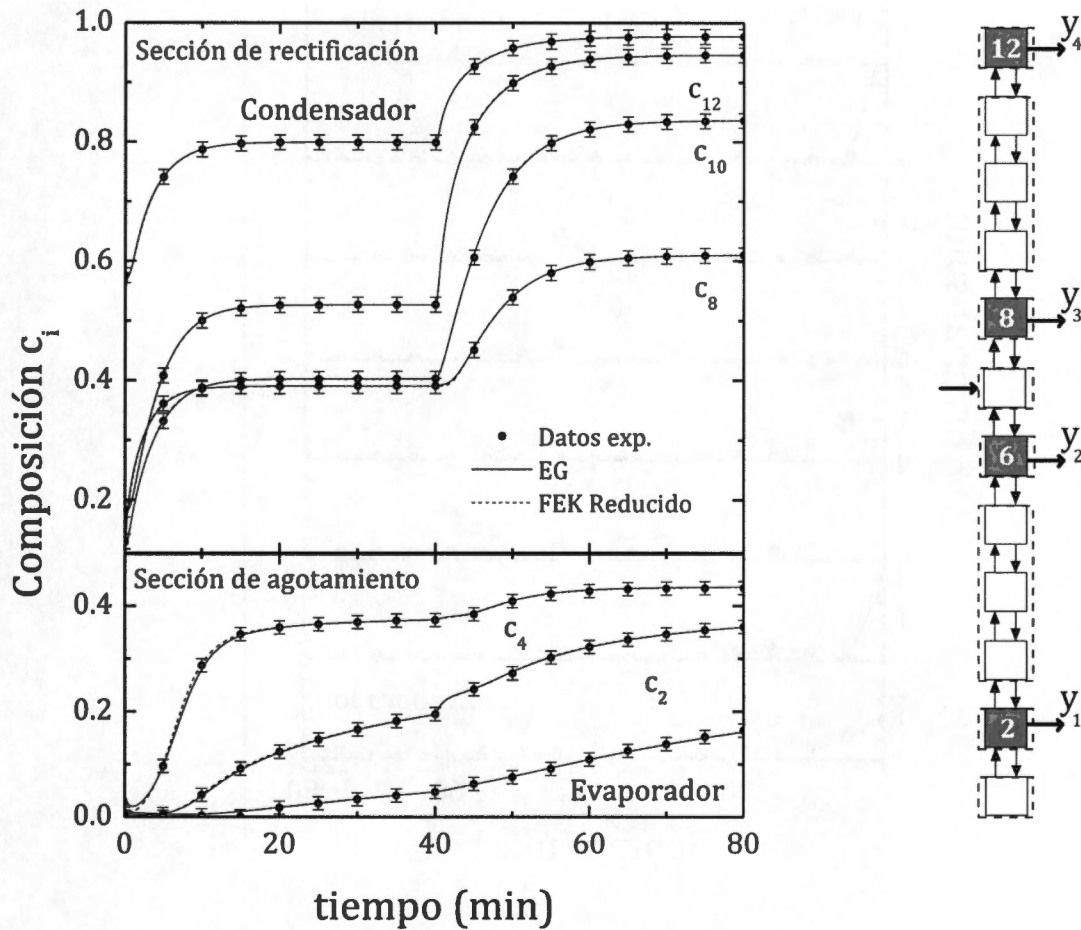


Figura 6.9. Estimación de perfil de composiciones con la mejor estructura encontrada comparando el estimador geométrico (EG) contra una versión reducida del filtro extendido de Kalman (FEK Reducido).

La estructura de estimación con innovación mínima, con cuatro mediciones (etapas 2, 6, 8 y 12) y modelo completo es la estructura más simple para inferir el perfil de las composiciones, dando excelentes resultados en la estimación de las composiciones de los efluentes. Los resultados obtenidos con el filtro extendido de Kalman son iguales que los obtenidos con el estimador geométrico, como se puede ver en la figura 6.10, y ambos realizan la tarea de estimación de manera muy eficiente.

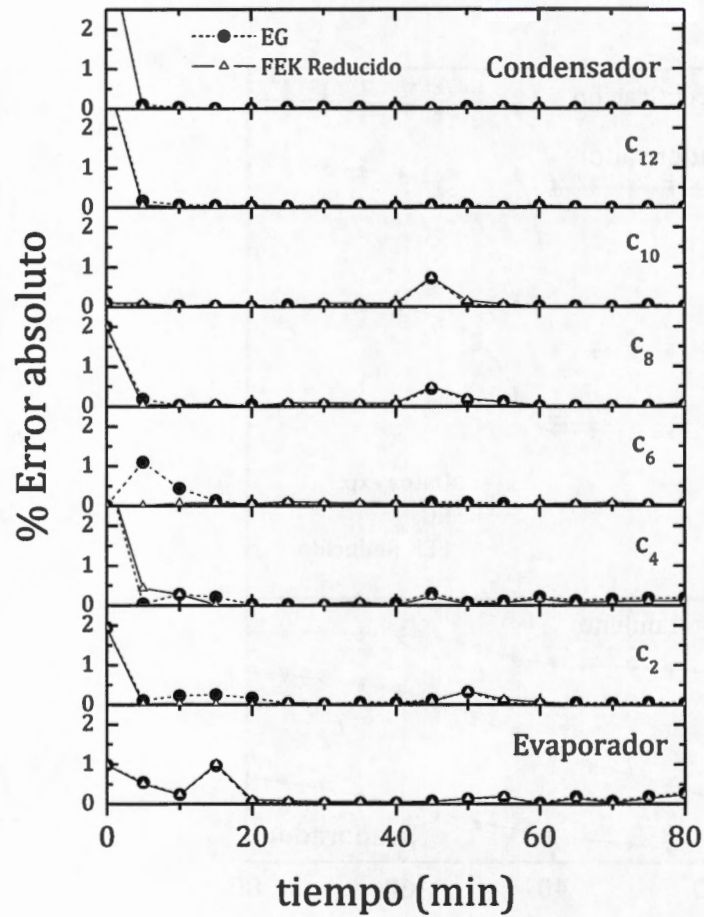


Figura 6.10. Error de estimación para la inferencia del perfil de composiciones con la mejor estructura encontrada comparando el estimador geométrico (EG) contra una versión reducida del filtro extendido de Kalman (FEK Reducido).

El filtro extendido de Kalman con cuatro mediciones e innovación en una etapa por medición supera al implementado con dos mediciones e innovación completa (figura 3.3) y la dimensión del estimador de cuatro mediciones es mucho menor (16 contra 90 ecuaciones diferenciales ordinarias). Además que su construcción es más fácil de implementar.

6.3 Resultados

Básicamente, las mejores estructuras en todos los casos analizados (desde el punto de vista del funcionamiento) están incluidos en el conjunto de estructuras candidatas obtenidas en la primera parte de la estrategia de estimación descrita en el capítulo 4.

Como consecuencia de la característica general de sintonización del estimador geométrico, se puede afirmar que los resultados estructurales son debidos a la estructura en si misma y no al proceso de sintonización del estimador, en el entendido (como se mencionó antes en el capítulo 1) de que este es un problema en los estudios existentes. Se determinó con los datos experimentales que el resultado estructural no depende del algoritmo de estimación, al comparar el desempeño del *filtro extendido de Kalman* contra el estimador geométrico. También se verificó la ventaja de elegir el modelo de estimación en base de los objetivos específicos de estimación.

En todos los casos, la relación entre orden de estimación y ventanas de frecuencias para el buen funcionamiento es congruente con los resultados del estudio de convergencia robusta del estimador geométrico (Álvarez y Fernández, 2009).

El diseño y selección de la estructura propuesto en el capítulo 4 mostró la facilidad y factibilidad de escoger estructuras candidatas, que nos llevan a la resolución de problema de selección de la estructura de forma manejable. Esto acoplado con el procedimiento de construcción y sintonización altamente sistemático del estimador geométrico, permitió establecer el funcionamiento más robusto en un estimador de composiciones para una columna de destilación binaria, y la determinación de la mejor estructura de acuerdo a un objetivo específico de estimación. La metodología propuesta es aplicable a cualquier tipo de columna de destilación binaria, sin tener ninguna restricción en cuanto a: (i) las características de la mezcla a separar (altas desviaciones termodinámicas de la idealidad), (ii) la operación del proceso (continuo o por lotes); o (iii) la dimensión de la columna.

Con el estudio de la columna de destilación y datos experimentales se determinó la mejor estructura de inferencia de composiciones para un objetivo específico de estimación. La ventaja de elegir el modelo de estimación en base de los objetivos específicos de estimación fue confirmada, y además de que lleva a estructuras que son *fáciles de implementar*.

Por ejemplo para el caso de inferencia de la composición de los efluentes dado por la estructura descrita por la siguiente expresión

$$\sigma = (\kappa = \{1, 1\}, c_v^1 = \{c_2\}, c_i^2 = \{c_{12}\}, c_v^1 = \{c_1\}), y = (T_2, T_{12})', n = 3$$

e implementada con el *estimador geométrico* y modelo truncado, nos lleva al siguiente sistema de ecuaciones ($n = 3$):

• *módulo no innovado 1* (c_v^1):

$$\dot{\hat{c}}_1 = f_1(\hat{c}_1, \hat{c}_2, u), \quad \hat{c}_1(0) = \hat{c}_{1o}$$

• *módulo innovado 1* (c_i^1):

$$\dot{\hat{c}}_2 = f_2(\hat{c}_1, \hat{c}_2, \bar{c}_3, u) + 1/\beta'(\hat{c}_2)\{ \hat{l}_1 + 2\zeta\omega(y_1 - \beta(\hat{c}_2)) \}, \quad \hat{c}_2(0) = \hat{c}_{2o}$$

$$\dot{\hat{l}}_1 = \omega^2 [y_1 - \beta(\hat{c}_2)], \quad \hat{l}_1(0) = \hat{l}_{1o}$$

• *módulo innovado 2* (c_i^2):

$$\dot{\hat{c}}_{12} = f_{12}(\bar{c}_{11}, \hat{c}_{12}, u) + 1/\beta'(\hat{c}_{12})\{ \hat{l}_2 + 2\zeta\omega(y_2 - \beta(\hat{c}_{12})) \}, \quad \hat{c}_{12}(0) = \hat{c}_{12o}$$

$$\dot{\hat{l}}_2 = \omega^2 [y_2 - \beta(\hat{c}_{12})], \quad \hat{l}_2(0) = \hat{l}_{2o}$$

donde $\beta'(\hat{c}_i) = \partial\beta(\hat{c}_i)/\partial\hat{c}_i$.

Una vez que el problema estructural de asimilación de información por las mediciones es adecuadamente resuelto vía el método de estimación geométrica, las tareas de estimación de los estados se pueden realizar adecuadamente y de igual manera con cualquier ley de estimación bien sintonizada.

CONCLUSIONES

En la presente tesis se ha estudiado el problema de estimación de composiciones en columnas de destilación binaria, en base a la combinación de un modelo con mediciones de temperatura, atendiendo a objetivos específicos de estimación y frente a las características físicas y termodinámicas de la columna. Los objetivos de estimación en la columna de destilación son inferir el perfil completo o parcial de composiciones, una o las dos composiciones de los efluentes.

Se ha resuelto el problema de diseño para la clase de columnas de destilación binaria. Este incluye la selección de: (i) *la estructura* (modelo completo o truncado, número de mediciones de temperatura y su ubicación, así como el mecanismo de asimilación y transmisión de la información de las mediciones), (ii) *y el algoritmo* (elección, construcción y sintonización del procesador dinámico de datos que realiza la tarea de estimación). Se tomó como punto de partida metodológico al reciente rediseño del estimador geométrico (Álvarez y Fernández, 2009) que ofrece: (i) a la estructura como grado de libertad, (ii) procedimiento sistemático de sintonización, y (iii) se implementa con jacobianos del modelo en vez de las derivadas direccionales de alto orden. En esta tesis se ha: (i) validado experimentalmente la versión rediseñada del estimador geométrico de propósito general desarrollado por Álvarez y Fernández (2009), con una clase particular de sistema (columna de destilación binaria), y (ii) encontrado la mejor estructura frente a un objetivo específico de estimación, mediante la conexión entre la estructura y desempeño de un estimador.

En base a las ideas de estimación geométrica con estructura de estimación ajustable frente a las características por etapas de la columna: (i) se ha definido la estructura de estimación para columnas en términos de *módulos* (conjunto de etapas adyacentes) con y sin innovación y de módulos innovados con medición en la frontera

o en el dominio, (ii) se considera la posibilidad de utilizar todo el modelo de la columna o parte de él y (iii) se considera la opción de submodelos y estructuras de innovación descentralizadas.

Específicamente, en esta tesis se ha abordado dos problemas. El primer problema consistió en: (i) valorar con datos experimentales la factibilidad (derivada teóricamente) de implementar un *estimador no lineal del tipo Luenberger* sin calcular *derivadas direccionales* (que en caso del sistema experimental empleado en este trabajo son doce) y (ii) verificar la equivalencia entre el estimador geométrico y el filtro extendido de Kalman. El segundo problema consistió en diseñar la estructura de estimación, que para un objetivo específico de estimación logra el mejor desempeño del algoritmo en términos de velocidad de reconstrucción y robustez. En el diseño estructural se ha incluido como grados de libertad: (i) la elección de modelo o parte de él, (ii) el número de mediciones y su ubicación, y (iii) el mecanismo de asimilación y transmisión de la información desde las mediciones de temperatura hasta las concentraciones de interés. Como un aspecto importante del trabajo, los resultados se validan con datos de experimentos realizados en la UAM-I que sirven para probar, validar e ilustrar la metodología propuesta.

Con el estudio de la columna de destilación y datos experimentales se verificó que: (i) el obstáculo de las derivadas de Lie en el estimador geométrico original (EGO) es removido efectivamente con el rediseño del estimador geométrico (EG), (ii) el estimador geométrico, que no tiene las ecuaciones dinámicas de Riccati (ERs), es equivalente en funcionamiento al filtro extendido de Kalman convencional (FEKC), y tiene un equivalente teórico bajo una estructura estocástica en particular (basada en el método geométrico) y (iii) el estimador geométrico estocástico efectivamente efectúa la tarea de estimación de la incertidumbre. Comparando con el FEKC, el estimador EG tiene un método más simple y más eficiente de modelar la incertidumbre y realizar la sintonización. La ventaja de elegir el modelo de estimación en base de los objetivos específicos de estimación fue confirmada.

La selección de la estructura de estimabilidad se aborda mediante las medidas de estimabilidad para el estimador geométrico, llevándonos a unas estructuras candidatas a ser evaluadas con la implementación de un estimador. Para el propósito de selección de mediciones se ha establecido que la matriz de observabilidad O y la matriz de Gramiana de observabilidad W_o llevan a los mismos resultados.

Una vez que el problema estructural de asimilación de información por las mediciones es adecuadamente resuelto vía el método de estimación geométrica, y se deja a un lado la comparación en términos de dimensionalidad y complejidad, las tareas de estimación de los estados y de la incertidumbre se pueden realizar adecuadamente y de igual manera con cualquier ley de estimación (EG, FEKG, EGS o FEKC) bien sintonizada. La metodología propuesta es aplicable a cualquier tipo de columna de destilación binaria, sin tener ninguna restricción en cuanto a: (i) las características de la mezcla a separar (altas desviaciones termodinámicas de la idealidad), (ii) la operación del proceso (continuo o por lotes); o (iii) la dimensión de la columna.

Entre los temas aún por estudiar y reportar se encuentran la aplicabilidad de la metodología propuesta a sistemas de destilación más complejos como lo son la destilación multicomponente o la destilación reactiva. Así como ver el alcance de los esquemas de estimación con retardos en las mediciones, y la combinación de mediciones discretas con continuas en la operación continua de la columna. Las mediciones discretas pueden ser mediciones de composiciones para corregir parámetros termodinámicos. Por último, para estimadores con sistemas variables de medición, aún hacen falta guías de sintonización.

La elección de la estructura de un modelo de regresión es esencialmente un problema de selección de variables. El objetivo es encontrar el modelo que mejor describa los datos, pero sin ser demasiado complejo. Esto se logra mediante el uso de criterios de selección de variables, como el criterio de información de Akaike (AIC) o el criterio de información bayesiano (BIC). Estos criterios permiten comparar diferentes modelos y seleccionar el que sea el más adecuado. En este artículo se discute el uso de estos criterios en el contexto de la selección de variables para modelos de regresión lineal. Se muestra cómo se pueden utilizar para seleccionar el modelo más adecuado entre un conjunto de candidatos. Se discute también el papel de la teoría de la información en la selección de variables y se muestra cómo se puede utilizar para seleccionar el modelo más adecuado. Finalmente, se discute el papel de la teoría de la información en la selección de variables y se muestra cómo se puede utilizar para seleccionar el modelo más adecuado.

En este artículo se discute el uso de los criterios de información de Akaike (AIC) y el criterio de información bayesiano (BIC) en el contexto de la selección de variables para modelos de regresión lineal. Se muestra cómo se pueden utilizar para seleccionar el modelo más adecuado entre un conjunto de candidatos. Se discute también el papel de la teoría de la información en la selección de variables y se muestra cómo se puede utilizar para seleccionar el modelo más adecuado. Finalmente, se discute el papel de la teoría de la información en la selección de variables y se muestra cómo se puede utilizar para seleccionar el modelo más adecuado.

REFERENCIAS

- Abdel-Jabbar, N., Kravaris, C. y Carnahan, B. (1998). "A Partially Decentralized State Observer and Its Parallel Computer Implementation." *Industrial & Engineering Chemical Research* 37(7): 2741-2761.
- Alonso, A. A., Kevrekidis, I. G., Banga, J. R. y Frouzakis, C. E. (2004a). "Optimal sensor location and reduced order observer design for distributed process systems." *Computers & Chemical Engineering* 28(1): 27-35.
- Alonso, A. A., Frouzakis, C. E. y Kevrekidis, I. G. (2004b). "Optimal Sensor Placement for State Reconstruction of Distributed Process Systems." *AIChE Journal* 50(7): 1438-1452.
- Alsop, A. and Edgar, T. F. (1990). "Nonlinear control of a high purity distillation column by the use of partially linearized control variables." *Computers & Chemical Engineering* 14(6): 665-678.
- Álvarez, J., Romagnoli, J. A. y Stephanopoulos, G. (1981). "Variable measurement structures for the control of a tubular reactor." *Chemical Engineering Science* 36(10): 1695-1772.
- Alvarez, J. and López, T. (1999). "Robust Dynamic State Estimation of Nonlinear Plants." *AIChE Journal* 45(1): 107-123.
- Alvarez, J. (2000). "Nonlinear state estimation with robust convergence." *Journal of Process Control* 10(1): 59-71.
- Alvarez, J. y Fernández, C. (2009). "Geometric estimation of nonlinear process systems." *Journal of Process Control* 19(2): 247-260.
- Antoniades, C. y Christofides, P. D. (2002). "Integrated optimal actuator/sensor placement and robust control of uncertain transport-reaction processes." *Computers & Chemical Engineering* 26: 187-203.
- Bagajewicz, M. J. (1997). "Design and retrofit of sensor networks in process plants." *AIChE Journal* 43(9): 2300-2306.

- Balasubramhanya, L. S. y Doyle, F. J. (1997). "Nonlinear control of a high-purity distillation column using a traveling-wave model." *AIChE Journal* 43(3): 703-714.
- Baratti, R., Alvarez, J. y Morbidelli, M. (1993). "Design and Experimental Verification of a Nonlinear Catalytic Reactor Estimator." *Chemical Engineering Science* 48(14): 2573-2585.
- Baratti, R., Bertucco, A., Da Rold, A. y Morbidelli, M. (1995). "Development of a Composition Estimator for Binary Distillation Columns. Application to a Pilot Plant." *Chemical Engineering Science* 50(10): 1541-1550.
- Baratti, R., Bertucco, A., Da Rold, A. y Morbidelli, M. (1998). "A composition estimator for multicomponent distillation columns-development and experimental test on ternary mixtures." *Chemical Engineering Science* 53(20): 3601-3612.
- Bastin, G. y Gevers, M. R. (1988). "Stable adaptive observers for nonlinear time varying systems". *IEEE Transactions on Automatic Control*, 33: 650-658.
- Bertucco, A., Da Rold, A. y Morbidelli, M. (1995). "Composition Estimators for a Distillation Column: Theory and Experiments." *Dycord+ '95, 4th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Chemical Reactors, Distillation Columns, and Batch Processes*: 489-494.
- Besançon, G. (2007). *Nonlinear Observers and Applications*. Nueva York, Springer-Verlag.
- Betlem, B. H. L., Rijnsdorp, J. E. and Azink, R. F. (1998). "Influence of tray hydraulics on tray column dynamics." *Chemical Engineering Science* 53(23): 3991-4003.
- Bhushan, M. y Rengaswamy, R. (2000). "Design of sensor location based on various fault diagnostic observability and reliability criteria." *Computers & Chemical Engineering* 24: 735-741.
- Bian, S. y Henson, M. A. (2006). "Measurement selection for on-line estimation of nonlinear wave models for high purity distillation columns." *Chemical Engineering Science* 61(10): 3210-3222.

- Brewer, J., Huang, Z., Singh, A. K., Misra, M. and Hahn, J. (2007). "Sensor network design via observability analysis and principal component analysis." *Industrial & Engineering Chemical Research* 46: 8026-8032.
- Buckley, P., Luyben, W. L. y Shunta, J. P. (1985). *Design of distillation column control systems*. Nueva York, Editorial Edward Arnold.
- Castellanos-Sahagun, E., Alvarez-Ramírez, J. y Alvarez, J. (2005). "Two-point temperature control structure and algorithm design for binary distillation columns." *Industrial & Engineering Chemical Research* 44: 142-152.
- Chmielewski, D. J., Palmer, T. y Manousiouthakis, V. (2002). "On the Theory of Optimal Sensor Placement." *AIChE Journal* 48(5 May): 1001-1012.
- Choe, Y. and Luyben, W. L. (1987). "Communications. Rigorous dynamic models of distillation columns." *Industrial & Engineering Chemical Research* 26: 2158-2161.
- Ciccarella, G., Dalla Mora, M. y Germani, A. (1993). "A Luenberger-like observer for nonlinear systems." *International Journal of Control* 57(3): 537-556.
- Coffey, D. P., Ydstie, B. E. and Farschman, C. A. (2000). "Distillation stability using passivity and thermodynamics." *Computers & Chemical Engineering* 24: 317-322.
- Colantuoni, G. y Padmanabhan, L. (1977). "Optimal sensor locations for tubular-flow reactor systems." *Chemical Engineering Science* 32: 1035-1049.
- Dazzo, J., Houpis, H. and Sheldon, S. N. (2003). *Linear control system analysis and design control engineering*. Nueva York, Marcel Dekker, Inc.
- Deza, F. y Gauthier, J. P. (1991). "Nonlinear observers for distillation columns." *Proceedings of the 30th Conference on Decision and Control Brighton, England.*: 1492-1493.
- Deza, F., Busvelle, E. y Gauthier, J. P. (1992). "Exponentially Converging Observers for Distillation Columns and Internal Stability of the Dynamic Output Feedback." *Chemical Engineering Science* 47(15): 3935-3941.

- Doherty, M. F. and Perkins, J. D. (1982). "On the dynamics of distillation processes IV: uniqueness and stability of the steady state in homogeneous continuous distillation." *Chemical Engineering Science* 37(3): 381-392.
- Fernández, C. (1996). Diseño y verificación experimental de un estimador no lineal de composiciones en una columna de destilación binaria a partir de mediciones de temperatura. Tesis de maestría en Ingeniería Química. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. (http://tesiuami.izt.uam.mx/uam/aspuam/ver_texto.php?recno=776&documento=UAM0776.PDF)
- Gani, R., Ruiz, C. A. and Cameron, I. T. (1986). "A generalized model for distillation columns-I: model description and applications." *Computers & Chemical Engineering* 10(3): 181-198.
- Gelb, A. (1974). *Applied optimal estimation*. Cambridge, MIT Press.
- Hahn, J. y Edgar, T. F. (2002). "An improved method for nonlinear model reduction using balancing of empirical gramians." *Computers & Chemical Engineering* 26(10): 1379-1397.
- Hammouri, H., Targui, B. y Armanet, F. (2002). "High-gain observer based on a triangular structure". *International Journal of Robust and Nonlinear Control* 12: 497-518.
- Harris, T. J., Macgregor, J. F. y Wright, J. D. (1980). "Optimal sensor location with an application to a packed bed tubular reactor." *AIChE Journal* 26(6): 910 - 916.
- Ingham, J., Dunn, I. J., Heinzle, E. and Prenosil, J. (2000). *Chemical engineering dynamics: an introduction to modelling and computer simulation*. Nueva York, Wiley-VCH.
- Jana, A. K., Samanta, A. N. y Ganguly, S. (2006). "Observer-based control algorithms for a distillation column." *Chemical Engineering Science* 61: 4071-4085.
- Johnson, C. D. (1969). "Optimization of a certain quality of complete controllability and observability for linear dynamical systems". *Transactions of the ASME*: 228-238.
- Joseph, B. y Brosilow, C. B. (1978). "Inferential Control of Processes: Part I. Steady State Analysis and Design." *AIChE Journal* 24(3 May): 485-492.

- Kadu, S. C., Bhushan, M. and Gudi, R. (2008). "Optimal sensor network design for multirate systems." *Journal of Process Control* 18: 594-609.
- Kaewpradit, P., Kittisupakorn, P., Thitayasook, P. y Mujtaba, I. M. (2008). "Dynamic composition estimation for a ternary batch distillation " *Chemical Engineering Science* 63: 3309-3318.
- Kazantzis, N. y Kravaris, C. (2000). "Nonlinear observer desing for process monitoring." *Industrial & Engineering Chemical Research* 39: 408-419.
- Khalil, H. K. (2002). *Nonlinear Systems*. Upper Saddle River, NJ, Prentice-Hall.
- Kister, H. (1990). *Distillation operation*. Nueva York, McGraw-Hill.
- Kookos, I. K. and Perkins, J. D. (1999). "A Systematic Method for Optimum Sensor Selection in Inferential Control Systems." *Industrial & Engineering Chemical Research* 38(11): 4299-4308.
- Krener, A. y Respondek, W. (1985). "Nonlinear observer with linearizable error dynamics." *SIAM J. Control Optimization*, 23(2), 197-216.
- Krstić, M., Kanellakopoulos, I., Kokotović, P. (1995). *Nonlinear and Adaptive Control Design*, Nueva York, Wiley Interscience.
- Kruger, U., Antony, D., Hahn, J., Irwin, G. W. and McCullough, G. (2005). "Introduction of a nonlinearity measure for principal component models." *Computers & Chemical Engineering* 29: 2355-2362.
- Kumar, S. y Seinfeld, J. H. (1978). "Optimal location of measurements in tubular reactors." *Chemical Engineering Science* 33: 1507-1516.
- Lang, L. y Gilles, E. D. (1990). "Nonlinear Observers for Distillation Columns." *Computers & Chemical Engineering* 14(11): 1297-1301
- Lau, H., Alvarez, J. y Jensen, K. F. (1985). "Synthesis of control structures by singular value analysis: dynamic measures of sensitivity and interaction." *AIChE Journal* 31(3): 427-439.
- Levy, R. E., Foss, A. S. and Grens II, E. A. (1969). "Response Modes of a Binary Distillation Column." *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 8(4 November): 765-776.

- Ljung, L. (1999). System identification: Theory for the user. Nueva Jersey, Prentice Hall.
- Loeblein, C. and Perkins, J. D. (1999). "Structural Design for On-Line Process Optimization: I. Dynamic Economic of MPC." AIChE Journal 45(5 May): 1018-1040.
- López, T. (2000). Estimación y control no lineal de reactores continuos de copolimerización en solución. Tesis de Doctorado en Ciencias. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. http://tesiuami.izt.uam.mx/uam/aspuam/ver_texto.php?recno=4398&documento=UAM4398.PDF
- López, T. y Alvarez, J. (2004). "On the effect of the estimation structure in the functioning of a nonlinear copolymer reactor estimator." Journal of Process Control 14: 99-109.
- Luyben, W. L. (1990). Process modeling, simulation, and control for chemical engineers. Nueva York, McGraw-Hill.
- Marino, R. and Tomei, P. (1995). Nonlinear control desing - Geometric, adaptive and robust. Nueva York, Prentice Hall.
- Mejdell, T. y Skogestad, S. (1991a). "Composition estimator in a pilot-plant distillation column using multiple temperatures." Industrial & Engineering Chemical Research 30(12): 2555-2564.
- Mejdell, T. y Skogestad, S. (1991b). "Estimation of Distillation Compositions from Multiple Temperature Measurements Using Partial-Least-Squares Regression." Industrial & Engineering Chemical Research 30(12): 2543-2555.
- Mejdell, T. y Skogestad, S. (1993). "Output Estimation Using Multiple Secondary Measurements: High-Purity Distillation." AIChE Journal 39(10 October): 1641-1653.
- Moore, B. C. (1981). "Principal Component Analysis In Linear Systems: Controllability, Observability And Model Reduction." IEEE Transactions on Automatic Control AC-26(1): 17-32.

- Morari, M. y Stephanopoulos, G. (1980). "Part III: optimal selection of secondary measurements with the framework of state estimation in the presence of persistent unknown disturbances." *AIChE Journal* 26: 247-259.
- Mujtaba, I. M. (2004). *Batch Distillation, design and operation*. Londres, Series on Chemical Engineering – Vol. 3, Imperial College Press.
- Müller, P. C. y Weber, H. I. (1972). "Analysis and Optimization of Certain Qualities of Controllability and Observability for Linear Dynamic Systems." *Automatica* 8: 237-246.
- Muradore, R., Bezzo, F. and Barolo, M. (2006). "Optimal sensor location for distributed-sensor systems using multivariable regression." *Computers & Chemical Engineering* 30(3): 521-535.
- Muske, K. R., Georgakis, C. and (2003). "Optimal Measurement System Design for Chemical Processes." *AIChE Journal* 49(6): 1488-1494.
- Nisenfeld, A. y Seemann, R. (1981). *Distillation columns*. USA, Instrument Society of America.
- Oisiovici, R. M. y Cruz, S. L. (2000). "State estimation of batch distillation columns using an extended Kalman filter." *Chemical Engineering Science* 55: 4667-4680.
- Oisiovici, R. M. y Cruz, S. L. (2001). "Inferential control of high-purity multicomponent batch distillation columns using an extended kalman filter." *Industrial & Engineering Chemical Research* 40: 2628-2639.
- Park, S. y Han, C. (2000). "A nonlinear soft sensor based on multivariate smoothing procedure for quality estimation in distillation columns." *Computers & Chemical Engineering* 24: 871-877.
- Perry, R. (1997). *Chemical Engineers's Handbook*. Séptima edición, Nueva York, McGraw-Hill.
- Petlyuk, F. B. (2004). *Distillation Theory and Its Application to Optimal Design of Separation Units*. Nueva York, Cambridge University Press.
- Pulis, A., Fernández, C., Baratti, R. y Alvarez, J. (2006). "Thermodynamic diagram based estimation structure design for ternary distillation columns." 16th European Symposium on Computer Aided Process Engineering and 9th

- International Symposium on Process Systems Engineering, 2006. (Tomo 2): 1563-1568.
- Pulis, A. (2007). Softsensor design for distillation columns. Tesis de doctorado de Investigación en Ingeniería Química. Università degli Studio de Cagliari. (http://www.diee.unica.it/dott_ing_ind/materiale/tesi/Tesi_Pulis1.pdf)
- Quintero-Marmol, E., Luyben, W. L. y Georgakis, C. (1991). "Application of an Extended Luenberger Observer to the Control of Multicomponent Batch Distillation." *Industrial & Engineering Chemical Research* 30(8): 1870-1880.
- Röbenack, K. (2005). "Computation of high-gain observers for nonlinear system using automatic differentiation." *Transactions of the ASME* 127: 160-162.
- Röbenack, K. (2007). "Observer design for a class of nonlinear systems with non-full relative degree." *Nonlinear Dynamics and Systems Theory* 7(4): 399-408.
- Roffel, B., Betlem, B. H. L. y de Blouw, R. M. (2003). "A comparison of the performance of profile position and composition estimators for quality control in binary distillation". *Computers & Chemical Engineering* 27(2): 199-210.
- Romagnoli, J. A., Alvarez, J. y Stephanopoulos, G. (1981). "Variable measurement structures for process control." *International Journal of Control* 33: 269-289.
- Rosenbrock, H. H. (1962). "A Lyapunov function with applications to some nonlinear physical systems." *Automatica* 1(1): 31-53.
- Sepulchre, R., Janković, M. y Kokotović, P.R. (1997). *Constructive Nonlinear Control, Communications and Control Engineering Series*, London, Springer-Verlag.
- Shin, J., Lee, M. y Park, S. (1999). "Design of a Composition Estimator for Inferential Control of Distillation Columns." *Chemical Engineering Communications* 178: 221-248.
- Shin, J., Seo, H., Han, M. y Park, S. (2000). "A nonlinear profile observer using tray temperatures for high-purity binary distillation column control." *Chemical Engineering Science* 55: 807-816.
- Singh, A. K. y Hahn, J. (2004). "Optimal sensor location for nonlinear dynamics systems via empirical gramians." *Proceedings of the DYCOPS 2004, Boston*.

- Singh, A. K. y Hahn, J. (2005a). "State estimation for high-dimensional chemical processes." *Computers & Chemical Engineering* 29(11-12): 2326-2334.
- Singh, A. K. y Hahn, J. (2005b). "Determining Optimal Sensor Locations for State and Parameter Estimation for Stable Nonlinear Systems." *Industrial & Engineering Chemical Research* 44(15): 5645-5659.
- Singh, A. K. y Hahn, J. (2006). "Sensor location for stable nonlinear dynamics systems: multiple sensor case." *Industrial & Engineering Chemical Research* 45: 3615-3623.
- Sjövall, P., McKelvey, T. and Abrahamsson, T. (2006). "Constrained state-space system identification with application to structural dynamics." 14th IFAC Symposium on System Identification, Newcastle, Australia, 2006: 1294-1299.
- Smith, C. y Corripio, A. (1994). *Control automático de procesos: teoría y práctica*. México, Editorial Limusa Noriega.
- Sontag, E. D. (1998). *Mathematical Control Theory: Deterministic Finite Dimensional Systems*. Nueva York, Springer.
- Stephanopoulos, G. (1984). *Chemical Process Control: An Introduction to Theory and Practice*. Nueva Jersey, Prentice-Hall.
- Stichlmair, J. y Fair, J. R. (1998). *Distillation: principles and practices*. Nueva York, Wiley-VCH.
- Targui, B., Hammouri, H. y Farza, M. (2001). "Observer design for a class of multi-output nonlinear systems - Application to a distillation column". *Proceeding of the 40th IEEE, Conference on Decision and Control, Orlando, Florida USA, December 2001*: 3352-3357.
- Tolliver, T. L. y McCune, L. C. (1980). "Finding the Optimum Temperature Control Trays for Distillation Columns." *Instrumentation Technology* 27(9): 75-80.
- Tronci, S., Bezzo, F., Barolo, M. y Baratti, R. (2005). "Geometric observer for a distillation column: development and experimental testing." *Industrial & Engineering Chemical Research* 44: 9884-9893.

- van den Berg, F. W. J., Hoefsloot, H. C. J., Boelens, H. F. M. y Smilde, A. K. (2000). "Selection of optimal sensor position in a tubular reactor using robust degree of observability criteria". *Chemical Engineering Science*, 55: 827-837.
- van den Berg, F. W. J., Boelens, H. F. M., Smilde, A. K. y Hoefsloot, H. C. J. (2001). "Process analyzer location and performance assessment for optimal process monitoring". *AIChE Journal*, 47(11): 2503-2514.
- van der Heijden, F., Duin, R. P. W., de Ridder, D. and Tax, D. M. J. (2004). *Classification, Parameter Estimation and State Estimation*. West Sussex, Inglaterra, John Wiley & Sons Ltd.
- Vande Wouwer, A., Point, N., Porteman, S. y Remy, M. (2000). "An approach to the selection of optimal sensor locations in distributed parameter systems." *Journal of Process Control* 10: 291-300.
- Venkateswarlu, C. y Avantika, S. (2001). "Optimal state estimation of multicomponent batch distillation." *Chemical Engineering Science* 56: 5771-5786.
- Venkateswarlu C. y Kumar B. J. (2006). "Composition estimation of multicomponent reactive batch distillation with optimal sensor configuration". *Chemical Engineering Science*, 61: 5260-5274.
- Waldraff, W., Dochain, D., Bourrel, S. and Magnus, A. (1998). "On the use of observability measures for sensor location in tubular reactor." *Journal of Process Control* 8(5-6): 497-505.
- Wang, G. B., Peng, S. S. y Huang, H. P. (1997). "A sliding observer for nonlinear process control." *Chemical Engineering Science* 52(5): 787-805.
- Wood, C. E. (1968). "Tray Selection for Column Temperature Control." *Chemical Engineering Progress* 64(1): 85-88.
- Yang, D. R. y Lee, K. S. (1997). "Monitoring of a Distillation Column Using Modified Extended Kalman Filter and a Reduced Order Model." *Computers & Chemical Engineering* 21(Supplement 1): S565-S570.
- Yu, C. C. y Luyben, W. L. (1987). "Control of multicomponent distillation columns using rigorous composition estimators." *ICHEME Symposium Series*(104): A29-A69.

- Zamprogna, E., Barolo, M., Seborg, D. E. y (2004). "Estimating product composition profiles in batch distillation via partial least squares regression". *Control Engineering Practice* 12: 917-929.
- Zamprogna, E., Baralo, M. y Seborg, D. E. (2005). "Optimal selection of soft sensor inputs for batch distillation columns using principal component analysis". *Journal of Process Control*, 15: 39-52.
- Zeitz, M. (1987). "The extended Luenberger observer for nonlinear systems." *Systems & Control Letters* 9: 149-156.

The first part of the paper discusses the importance of...

The second part of the paper discusses the importance of...

The third part of the paper discusses the importance of...

The fourth part of the paper discusses the importance of...

The fifth part of the paper discusses the importance of...

APÉNDICES

182

Apéndice A: Notación

a	Coefficiente de partición en una mezcla heterogénea
a_1^i	Coefficiente de polinomio característico de la asignación de polos
a_i	Números enteros definidos en el apéndice E
A	Matriz del sistema lineal de dimensión $n \times n$
A°	Parámetro de la ecuación de Antoine
\mathcal{A}	Jacobiano del sistema $\partial f_i / \partial x_i$
$bd[]$	Bloque diagonal
B°	Parámetro de la ecuación de Antoine
c	Vector de composiciones
C	Matriz del sistema lineal de dimensión $m \times n$
C°	Parámetro de la ecuación de Antoine
c_A	Fracción molar del componente volátil en el líquido de la alimentación
c_B	Fracción molar del componente volátil en el líquido del producto de fondo
c_D	Fracción molar del componente volátil en el líquido del destilado
c_i	Fracción molar del componente volátil en el líquido de la etapa i -ésima
c_i	Vector de composiciones innovadas
c_v	Vector de composiciones no innovadas
c_o	Vector de condiciones iniciales en las composiciones
c^v_i	Fracción molar del componente volátil en el vapor de la etapa i -ésima
G_i	Jacobiano $\partial h_i / \partial x_i$
c_{π_j}	Composición en la etapa de la j -ésima medición de temperatura
f	Vector de funciones del lado derecho de los balances de materia
f_i	Vector de funciones de la dinámica innovada
f_v	Vector de funciones de la dinámica no innovada
f_β	Función implícita de temperatura y composición

F_A	Flujo molar de la alimentación (gr-mol/min)
F_B	Flujo molar del producto de fondo (gr-mol/min)
F_{Bo}	Flujo nominal de referencia para el controlador de nivel en el evaporador
F_c	Vector de las funcionalidades de composición
F_{c_i}	Funcionalidad de composición en la etapa i
F_D	Flujo molar del producto destilado (gr-mol/min)
F_M	Vector de las funcionalidades de líquidos retenidos
F_{M_i}	Funcionalidad de líquidos retenidos en la etapa i
F_R	Corriente de reflujo (gr-mol/min)
h	Vector de funcionalidades de las mediciones
k_{FB}	Ganancia del controlador de nivel en el evaporador
k	Coefficiente de actividad líquido-vapor [$k = \varepsilon(c)/c$]
K	Ganancia de un estimador
K_{FEK}	Ganancia de filtro extendido de Kalman
K_i	Matriz de ganancia de la acción integral
K_y	Matriz de ganancias del estimador geométrico
L_i	Líquido que cae de la etapa i -ésima
$L_f^i h$	i -ésima derivada direccional de Lie del campo escalar h para el campo f
$\mathcal{L}_i(p_i, \omega)$	Operador diferencial lineal
m	Número de mediciones (o dimensión del sistema de mediciones)
M	Vector de líquidos retenidos
M_o	Vector de condiciones iniciales en los líquidos retenidos
M_B	Líquido retenido en el evaporador (gr-mol)
M_i	Líquido retenido en la etapa i -ésima (gr-mol)
M_o	Líquido que se retiene en un plato con flujo cero (gr-mol)
M_{sp}	Valor de referencia en el control de nivel en el evaporador (gr-mol)
n	Número de etapas en la columna (o dimensión del sistema)
n_r	Número de etapas en la columna en un modelo reducido
n_A	Etapas de alimentación
N_i	Reglón de la matriz de observabilidad de un sistema variante en tiempo

O	Matriz de observabilidad lineal
p	Vector de parámetros del proceso
p_i	Polinomio característico de la asignación de polos en la ecuación 3.24
P	Covariancia del error de modelado en el filtro extendido de Kalman
P^o_i	Presión de vapor del componente volátil puro en la etapa i -ésima
P_T	Presión total
P_i	Covariancia del error de estimación
(\mathcal{P}, ω)	Esquema de asignación de polos
q_c	Errores en las composiciones
q_i	Covariancia del error del estado i
q_M	Errores en los líquidos retenidos
q_u	Errores en las entradas al proceso
q_y	Errores en las mediciones
Q	Matriz de covariancia del error del modelo
r	Relación de reflujo (F_R/F_D)
r_i	Covariancia del error de la medición i
r_i	Números enteros definidos en el apéndice E
\mathcal{R}	Conjunto de elementos $\{r_1, \dots, r_{n-1}\}$ definido en el apéndice E
R	Covariancia del error de las mediciones
R_o	Constante general de los gases ideales
S	Número de estructuras observables
t	Tiempo
T_j	j -ésima medición de Temperatura
u	Vector de las entradas al proceso
V	Flujo molar de vapor (gr-mol/min)
v_i	Volumen molar del componente puro (Ec. de Wilson)
x	Vector de estados
x_i	Vector de estados de la dinámica innovada
x_v	Vector de estados de la dinámica no innovada
x_i-x_v	Partición de estados

x_{t_0}	Condiciones iniciales del vector de estados
X	Conjunto de dimensión n que define los valores de x
y	Vector de mediciones
Y	Conjunto de dimensión m que define los valores de y
y_u	Vector de entradas al proceso considerando errores
z	Vector de objetivos de estimación

Letras griegas:

α^o	Volatilidad relativa de una mezcla binaria [k_1/k_2]
α	Parámetro de la ecuación de Francis
β	Funcionalidad para la expresión de punto de burbuja
$\chi_u(\tau, x_{t_0})$	Trayectoria del sistema ante una perturbación u
δ_{i,n_A}	Delta de Kronecker
Δ	Arreglo de ceros y unos definido en la ecuación 3.41
ε	Funcionalidad para la expresión del equilibrio líquido-vapor
γ	Coefficiente de actividad
Γ	Arreglo de ceros y unos definido en la ecuación 3.40
η	Funcionalidad para la expresión de la hidráulica de plato
κ	Vector de órdenes de estimación
κ_i	Orden global de estimación
κ_i	Orden de estimación para la i -ésima salida
λ	Tiempo característico
λ_i	Tiempo característico de la etapa i
$\lambda_{ij} - \lambda_{ii}$	Energía de interacción entre moléculas (Ec. de Wilson)
Λ_{ij}	Parámetro de la ecuación de Wilson.
π_j	Etapas en donde se localiza la j -ésima medición de temperatura

Π	Matriz de ceros y unos definida en la ecuación 3.22
ρ_M	Densidad molar de la mezcla líquida
σ	Estructura de estimación
Σ	Conjunto de estructuras de estimación admisibles
Σ_G	Matriz de covariancia definida en la ecuación 3.38
τ	Tiempo en un instante para $0 \leq \tau \leq t$
τ_η	Tiempo característico de la hidráulica de plato (seg)
ω	Frecuencia característica
Ω	Matriz de estimabilidad no lineal
$\tilde{\Omega}$	Matriz de error en la aproximación O de Ω (ecuación 3.28)

1	Introduction
2	1.1. The problem
3	1.2. The model
4	1.3. The numerical method
5	1.4. The results
6	1.5. Conclusions
7	2. Theoretical analysis
8	2.1. The linearized problem
9	2.2. The nonlinear problem
10	2.3. The stability analysis
11	2.4. The convergence analysis
12	2.5. The error analysis
13	2.6. The numerical results
14	2.7. The conclusions
15	3. Numerical results
16	3.1. The linearized problem
17	3.2. The nonlinear problem
18	3.3. The stability analysis
19	3.4. The convergence analysis
20	3.5. The error analysis
21	3.6. The numerical results
22	3.7. The conclusions
23	4. Conclusions
24	5. Acknowledgements
25	6. References

Apéndice B: Relaciones funcionales

Las relaciones funcionales que se presentan en esta apéndice corresponde a hidráulica de plato (η), del equilibrio líquido-vapor (ϵ) y la expresión de punto de burbuja (β), y son expresiones que comúnmente se emplean en la resolución de las ecuaciones de modelos de columnas de destilación, como el que se plantea en el capítulo 2 (Holmes y Van Winkle, 1970; Kister, 1990; Luyben, 1990; Smith y Corripio, 1994; Fernández, 1996; Perry, 1997; Catellanos-Sahagún, 2005). También se incluye el control de nivel del líquido en el evaporador.

- **Funcionalidad de hidráulica de plato $\eta(M)$:**

Una expresión muy usada para representar los flujos que caen del plato, es la ecuación de Francis:

$$L = \eta(M) = k\rho_M \left(\frac{M - M_o}{A\rho_M} \right)^{1.5} = \alpha (M - M_o)^{1.5} \quad \text{B.1}$$

Donde L es el líquido que cae del plato, M es la masa de la mezcla líquida retenida en el plato, M_o es la masa del líquido que se retiene con flujo cero, ρ_M es la densidad molar de la mezcla líquida, k es una constante de la geometría del plato y α es el parámetro de la ecuación de Francis. La ecuación A.1 muestra que el parámetro α depende de la densidad molar de la mezcla, sin embargo por fines prácticos en la literatura el valor de α se considera constante. Usualmente se determina un valor óptimo con datos experimentales en estado estacionario (Fernández, 1996).

La densidad molar de la mezcla binaria se calcula mediante la siguiente expresión:

$$\rho_M = \frac{c \rho_1}{PM_1} + \frac{(1 - c) \rho_2}{PM_2} \quad \text{B.2}$$

Donde ρ_i es la densidad del componente puro y PM_i es su peso molecular.

Otra expresión que frecuentemente es usada es la siguiente relación lineal entre el líquido retenido y el flujo que desciende del plato:

$$L = \eta(M) = \bar{L} + \frac{M - \bar{M}}{\tau_\eta} \quad \text{B.3}$$

Donde $(\bar{\quad})$ denota el valor en estado estacionario y τ_η es el tiempo característico de la hidráulica de plato (seg.), típicamente entre 3 a 6 segundos por plato.

- **Funcionalidad de hidráulica equilibrio líquido-vapor $\varepsilon(c)$:**

El equilibrio termodinámico en una mezcla líquido-vapor se alcanza cuando en ambas fases la fugacidad es la misma, es decir el número de moléculas que sale y entra de cada fase es el mismo. La fugacidad del líquido es igual a la presión de vapor, de aquí que la relación entre la composición de líquido y el vapor para una mezcla binaria sea:

$$c^v = \varepsilon(c) = \frac{\gamma c P^o}{P_T} \quad \text{B.4}$$

Donde c^v es la composición de la mezcla en la fase vapor, P^o es la presión de vapor del componente puro, P_T es la presión total y γ es el coeficiente de actividad. La presión de vapor del componente puro se calcula mediante la ecuación de Antoine:

$$\ln P^o = A^o - \frac{B^o}{T + C^o} \quad \text{B.5}$$

Los coeficientes de actividad se pueden calcular mediante números métodos, como lo son las ecuaciones de Margules, Van Laar, Wilson, NRTL, UNIFAC ó UNICUAC. En este trabajo se usa la ecuación de Wilson. Para un sistema binario tenemos:

$$\ln \gamma_1 = -\ln(c + \Lambda_{12}(1-c)) + (1-c) \left[\frac{\Lambda_{12}}{c + \Lambda_{12}(1-c)} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}c + (1-c)} \right] \quad \text{B.6}$$

$$\ln \gamma_2 = -\ln(1 - c + \Lambda_{21}c) - c \left[\frac{\Lambda_{12}}{c + \Lambda_{12}(1-c)} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}c + (1-c)} \right] \quad \text{B.7}$$

Donde los parámetros Λ_{12} y Λ_{21} están dados por:

$$\Lambda_{12} = \frac{v_2}{v_1} \exp \left[-\frac{\lambda_{12} - \lambda_{11}}{R_o T} \right] \quad \text{B.8}$$

$$\Lambda_{21} = \frac{v_1}{v_2} \exp \left[-\frac{\lambda_{12} - \lambda_{22}}{R_o T} \right] \quad \text{B.9}$$

v_1 y v_2 son los volúmenes molares de los componentes puros. $\lambda_{12} - \lambda_{11}$ y $\lambda_{12} - \lambda_{22}$ son las energías de interacción entre moléculas y R_o es la constante general de los gases ideales.

• **Funcionalidad para la expresión de punto de burbuja (β)**

En la temperatura del punto de burbuja, la presión total de vapor ejercida por la mezcla es igual a la presión total del depósito y se deduce que en la burbuja formada:

$$\sum_{i=1}^2 c^V_i = 1 = \frac{\gamma_1 c P^{o_1}}{P_T} + \frac{\gamma_2 (1-c) P^{o_2}}{P_T} \quad \text{B.10}$$

La expresión anterior es una función implícita de temperatura, composición y presión. La presión total del sistema es conocida, esto permite calcular de manera unívoca a la temperatura, dada una composición, y se resuelve empleado el método de Newton-Raphson:

$$f_\beta(T) = \frac{\gamma_1 c P^{o_1}}{P_T} + \frac{\gamma_2 (1-c) P^{o_2}}{P_T} - 1 = 0, \quad T_{n+1} = T_n - \frac{f_\beta(T)}{f'_\beta(T)}, \quad f'_\beta(T) = \frac{\partial f_\beta(T)}{\partial T} \quad \text{B.11}$$

- **Control de nivel para el líquido en el evaporador**

Para mantener el nivel de líquido constante en el evaporador, se diseñó un control proporcional de nivel (Luyben, 1990):

$$F_B = F_{B0} - k_{FB} (M_{sp} - M_1) \quad \text{B.12}$$

donde k_{FB} es la ganancia del controlador, M_{sp} es el valor de referencia, gr-mol y F_{B0} es el flujo nominal de referencia. Se sintonizó el control lo suficientemente rápido para que sea valido considerar que el volumen permanezca constante.

Apéndice C: Instrucciones de arranque y operación del sistema experimental

El equipo de destilación descrito en la sección 2.4 está diseñado para operación continua. El rango de diseño para las temperaturas de operación es de 60o a 105oC aproximadamente. Ejemplos de mezclas que se pueden separar en este equipo son:

- a) Benceno – Tolueno (Poco recomendable por cuestiones de seguridad).
- b) n-Heptano – n-Octano.
- c) Cloroformo – Tricloro etileno.
- d) Acetona – Metanol.
- e) Metanol – Agua.
- f) Etanol – Agua.
- g) Metanol – Etanol.

El primer componente de cada mezcla binaria corresponde al componente volátil. La primera mezcla se recomienda no trabajarse en esta columna por lo inflamable de los componentes.

• *Arranque y operación de la columna*

- 1.- Llene el tanque de abastecimiento con la mezcla a ser separada. Verifique que todos los refrigerantes este conectados desde abajo hacia arriba. Abra la llave de paso del agua de enfriamiento. No lo haga de manera brusca, sino que gradualmente aumente el flujo de agua. Llevar el registro del rotámetro.
- 2.- Verifique que todas las válvulas de los diferentes componentes de la columna estén cerradas. Abra la válvula del tanque de abastecimiento y mantenga cerrada la válvula de salida del prealimentador (sección de alimentación en la Figura 2.4).
- 3.-Una vez lleno el prealimentador, abrir la válvula que alimenta a la columna. Esperar hasta que se llene el evaporador. Revisar que no haya fugas. Cuando se llene, cerrar la válvula del tanque de abastecimiento.

4.- Ajustar la referencia del termómetro de precisión del evaporador y el prealimentador a la temperatura del componente volátil. Esto se hace girando el tornillo del cabezal del termómetro de precisión.

5.- Prender el sistema de calentamiento, suministrando el 50% del total de la potencia del calentador. En esta primera etapa, solo se debe prender el control 1 de suministro de calor a la bujía de calentamiento. Esto es por motivos de seguridad en el equipo. El control 1 de calentamiento activa la parte baja de la bujía de calentamiento. Si la temperatura sube muy lento, aumentar la potencia, procurando que la ebullición de la mezcla en el evaporador no sea violenta.

6.- Cuando la mezcla alcance la temperatura requerida (comparar el valor en el termómetro de precisión con el del termómetro del sistema digital de monitoreo de temperaturas), iniciar el abastecimiento a la columna con un flujo regular de la mezcla.

7.- Aumente la temperatura del sistema de calentamiento al valor de la operación deseada. Verifique que los platos se empiecen a llenar. La mezcla líquida retenida en el plato no debe ser abundante, para no inundarlos.

8.- Después de estar operando el tiempo pertinente a reflujo total, fije el valor deseado de la relación de reflujo en el control de la válvula solenoide. Se debe contar con los cálculos de los flujos de destilado y de fondos, en base al flujo de alimentación.

9.- Es necesario ajustar algunas veces la potencia del suministro de calor y la relación de reflujo para tener los flujos internos (líquido-vapor) adecuados para que los platos trabajen correctamente. Esto se verifica cuando se observan niveles de 5 a 25 ml. Se debe verificar y llevar registro del nivel en el evaporador y el prealimentador. En esta etapa, ya se debe usar el control 2 de suministro de calor. La bujía de calentamiento nunca debe operar en seco, si esto pasa, se debe de apagar los controles 1 y 2 de suministro de calor. Si el cambio la temperatura del evaporador es demasiado, puede aumentar la potencia de calentamiento. Mediante el monitoreo de las temperaturas, se determina cuando se llega a un estado estacionario.

10.- Se puede aplicar el cambio de operación planeado en el experimento. Monitoreando los flujos y verificando que: (i) nunca se vacíe el evaporador y el prealimentador, (ii) no se inunden o sequen los platos, (iii) que no se inunde la

columna y (iv) que nunca se exceda de la temperatura de diseño de operación de la columna.

- ***Paro de operación de la columna***

- 1.- Lo primero es cortar el suministro de calor a las bujías de calentamiento.
- 2.- Mantener abierto el flujo de agua de enfriamiento. Esperar a que la temperatura del evaporador baje.
- 3.- Cerrar las válvulas de los flujos de alimentación, de destilados y de fondos. Cerrar la válvula del tanque de abastecimiento.
- 4.- Cuando la temperatura del evaporador sea baja, cerrar el agua de enfriamiento.
- 5.- Vaciar la columna cuando los líquidos remanentes estén a temperatura ambiente. Drenar todos los refrigerantes de la columna.
- 6.- Antes de realizar cualquier cambio de configuración de la columna o accesorios, verificar que no quede líquido en ningún depósito de la columna o refrigerante.

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

... (faint text)

Apéndice D: Parámetros y condiciones de operación del sistema experimental

- **Condiciones fijas:**

Sistema a separar: metanol - agua

$n = 12$

$n_A = 7$

$M_I = 60.0 \text{ gr-mol}$

$P_T = 83.1 \text{ kPa}$ (Ciudad de México)

- **Condiciones iniciales:**

$F_A = 1.72 \text{ gmol/min}$ (40.0 ml)

$F_D = 0.68 \text{ gmol/min}$

$V = 0.82 \text{ gmol/min}$

$r = 0.22$

- **Estados estacionarios:**

Etapa		Estados estacionarios		
		Inicial, $t = 0 \text{ min}$	Intermedio $t = 40$	Final, $t = 80 \text{ min}$
1	Evaporador	0.001	0.048	0.159
2	Plato 1	0.001	0.195	0.360
3	Plato 2	0.002	0.326	0.423
4	Plato 3	0.006	0.373	0.435
5	Plato 4	0.021	0.386	0.438
6	Plato 5	0.060	0.389	0.438
7	Alimentación	0.130	0.390	0.438
8	Plato 6	0.130	0.391	0.610
9	Plato 7	0.130	0.394	0.742
10	Plato 8	0.131	0.403	0.836
11	Plato 9	0.136	0.433	0.901
12	Plato 10	0.184	0.527	0.946
Destilado	Condensador	0.576	0.799	0.977
Líquido retenido ml. (gr-mol)	Rectificación	6.5 (0.32)	8.3 (0.32)	18.9 (0.49)
	Agotamiento	17.7 (0.93)	18.6 (0.98)	22.7 (1.02)
	Evaporador	1,069 (60)	1,098 (60)	1,069 (60)

Tiempo característico dominante en la columna (min.)	Estado estacionario		
	Inicial (t = 0 min.)	Intermedio (t = 40 min.)	Final (t = 80 min.)
Dinámica Hidráulica: τ_{η}	1.6	1.6	2
Dinámica de Composiciones: τ_c	16	16	19

- **Parámetros termodinámicos [Holmes y Van Winkle, 1970] e hidráulicos:**

$$R_o = 1.987 \text{ cal / K gr-mol}$$

	Metanol	Agua
A^o	16.4948	16.5362
B^o	3593.39	3985.44
C^o	-35.2249	-38.9974
v_i	41.5	18.2

$$\alpha = 3 \text{ (grmol}^{0.5}\text{/min.)}$$

$$M_o = 0.2 \text{ gr-mol}$$

Apéndice E: Nociones de observabilidad

Para abordar el problema de diseño de un estimador o un controlador, es necesario verificar primero que la estructura de estimación cumpla con las propiedades de observabilidad y controlabilidad (Hermann y Krener, 1977), entendidas como propiedades fundamentales que establecen las limitaciones esenciales de lo que se puede lograr con cualquier esquema de control, ya sea convencional o avanzado.

Considerando el sistema no lineal descrito por las ecuaciones

$$\dot{x} = f(x, u, p), \quad x(0) = x_0 \quad \dim x = n \quad \text{E.1}$$

$$y = h(x, p) \quad \dim y = m \quad \text{E.2}$$

el sistema es *localmente observable* si (Zeitz, 1987) se cumple:

$$\text{rango} \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} L_f^0 h \\ \vdots \\ L_f^{n-1} h \end{bmatrix} = \text{dimensión de } x = n \quad \text{E.3}$$

Donde $L_f^i h(x)$ es la i -ésima derivada direccional recursiva de Lie del campo escalar variante en tiempo h a lo largo del campo vectorial f y se define:

$$L_f^{i+1} h = L_f(L_f^i h), \quad L_f h = \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial t}, \quad L_f^0 h = h \quad \text{E.4}$$

Linealizando el sistema (ecuaciones E.1 y E.2) al rededor de un estado estacionario obtenemos el siguiente *sistema lineal invariante en tiempo (SLIT)*:

$$\dot{x} = A x, \quad x(0) = x_0 \quad \dim x = n \quad \text{E.5}$$

$$y = C x \quad \dim y = m \quad \text{E.6}$$

El cual es localmente observable cuando se cumple la siguiente condición (Chen, 1984; Nijmeijer y van der Schaft, 1990; Isidori, 1995):

$$\text{rango } O = \text{rango} \begin{bmatrix} C \\ CA \\ \vdots \\ CA^{n-1} \end{bmatrix} = \text{dimensión de } x = n \quad \text{E.7}$$

Donde $A = \partial f / \partial x$ y $C = \partial h / \partial x$.

Cuando se linealiza el sistema (ecuaciones E.1 y E.2) al rededor de una trayectoria se obtiene el *sistema lineal variante en tiempo (SLVT)*:

$$\dot{x} = A(t) x, \quad x(0) = x_0 \quad \text{dim } x = n \quad \text{E.8}$$

$$y = C(t) x \quad \text{dim } y = m \quad \text{E.9}$$

El cual es observable cuando se cumple la siguiente condición:

$$\text{rango } N = \text{rango} \begin{bmatrix} N_0(t) \\ \vdots \\ N_{n-1}(t) \end{bmatrix} = \text{dimensión de } x = n \quad \text{E.10}$$

Donde N_i se define:

$$N_{i+1}(t) = N_k(t) A(t) + \partial N_k(t) / \partial t, \quad N_0(t) = C(t), \quad A(t) = \partial f(t) / \partial x, \quad C(t) = \partial h(t) / \partial x.$$

El arreglo descrito por la ecuación E.9 es una aproximación exacta (representación) del arreglo descrito en la ecuación E.3 y ambos aplican para el sistema no lineal (ecuaciones E.1 y E.2).

Apéndice F: Índices de observabilidad de un sistema no lineal

Dado el sistema no lineal:

$$\dot{x} = f(x, u), \quad y = h(x, u), \quad \dim x = n, \quad \dim y = m$$

la matriz de observabilidad Ω_T (para cada tiempo t a largo de una trayectoria) es:

$$\Omega_T = \partial\Phi/\partial x = \partial_x\Phi, \quad \Phi = [\Phi_1'(x, u), \dots, \Phi_n'(x, u)]' \quad \Phi_i = \begin{bmatrix} L_f^{i-1}h_1 \\ \vdots \\ L_f^{i-1}h_m \end{bmatrix}$$

Los pasos a seguir para determinar los *índices de observabilidad* son:

a) Se definen los n números enteros a_1, \dots, a_n de la siguiente forma:

$$a_1 = \text{rango} [\partial_x\Phi_1], \quad a_2 = \text{rango} \begin{bmatrix} \partial_x\Phi_1 \\ \partial_x\Phi_2 \end{bmatrix}, \quad \dots, \quad a_{n-1} = \text{rango} \begin{bmatrix} \partial_x\Phi_1 \\ \vdots \\ \partial_x\Phi_{n-1} \end{bmatrix}, \quad a_n = \text{rango} \begin{bmatrix} \partial_x\Phi_1 \\ \vdots \\ \partial_x\Phi_n \end{bmatrix}$$

o con la formula recursiva: $a_i = \text{rango} \begin{bmatrix} \partial_x\Phi_1 \\ \vdots \\ \partial_x\Phi_i \end{bmatrix}$

b) Se definen los n números enteros r_1, \dots, r_n de la siguiente forma:

$$r_1 = a_1, \quad r_2 = a_2 - a_1, \quad \dots, \quad r_{n-2} = a_{n-2} - a_{n-3}, \quad r_{n-1} = a_{n-1} - a_{n-2}, \quad r_n = a_n - a_{n-1}$$

c) Los m índices de observabilidad se definen como sigue:

$k_1 =$ número de enteros en el conjunto $\mathcal{R}: \{r_1, \dots, r_{n-1}\}$ que son mayores o iguales a 1

$k_2 =$ número de enteros en el conjunto $\mathcal{R}: \{r_1, \dots, r_{n-1}\}$ que son mayores o iguales a 2

:

$k_m =$ número de enteros en el conjunto $\mathcal{R}: \{r_1, \dots, r_{n-1}\}$ que son mayores o iguales a m

Apéndice G: Ganancias para el estimador geométrico

Vector de ganancias para $\kappa = 1$

$$K_y = (k_1) = (\omega)$$

Vector de ganancias para $\kappa = 2$

$$K_y = (k_1, k_2)' = (2\zeta\omega, \omega^2)'$$

Vector de ganancias para $\kappa = 3$

$$K_y = (k_1, k_2, k_3)' = [(2\zeta+1)\omega, (2\zeta+1)\omega^2, \omega^3]'$$

Vector de ganancias para $\kappa = 4$

$$K_y = (k_1, k_2, k_3, k_4)' = [4\zeta\omega, (4\zeta+2)\omega^2, 4\zeta\omega^3, \omega^4]'$$

Vector de ganancias para $\kappa = 5$

$$K_y = (k_1, k_2, k_3, k_4, k_5)' = [(4\zeta+1)\omega, (4\zeta^2+4\zeta+2)\omega^2, (4\zeta^2+4\zeta+2)\omega^3, (4\zeta+1)\omega^4, \omega^5]'$$

Vector de ganancias para $\kappa = 6$

$$K_y = (k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6)' \\ = [6\zeta\omega, (12\zeta^2+3)\omega^2, (8\zeta^2+12)\omega^3, (12\zeta^2+3)\omega^4, 6\zeta\omega^5, \omega^6]'$$

Vector de ganancias para $\kappa = 7$

$$K_y = (k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6, k_7)' \\ = [(6\zeta+1)\omega, (12\zeta^2+6\zeta+3)\omega^2, (8\zeta^3+12\zeta^2+12\zeta+3)\omega^3, (8\zeta^3+12\zeta^2+12\zeta+3)\omega^4, \\ (12\zeta^2+6\zeta+3)\omega^5, (6\zeta+1)\omega^6, \omega^7]'$$

Vector de ganancias para $\kappa = 12$

$$K_y = (k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6, k_7, k_8, k_9, k_{10}, k_{11}, k_{12})' \\ = [12\zeta\omega, (60\zeta^2+6)\omega^2, (160\zeta^3+60\zeta)\omega^3, (240\zeta^4+240\zeta^2+15)\omega^4, \\ (192\zeta^4+480\zeta^2+120\zeta)\omega^5, (64\zeta^6+480\zeta^4+360\zeta^2+20)\omega^6, (192\zeta^4+480\zeta^2+120\zeta)\omega^7, \\ (240\zeta^4+240\zeta^2+15)\omega^8, (160\zeta^3+60\zeta)\omega^9, (60\zeta^2+6)\omega^{10}, 12\zeta\omega^{11}, \omega^{12}]'$$

Ganancias basadas en polinomios de Butterworth

Vector de ganancias para $\kappa = 1$

$$K_y = (k_1) = (\omega)$$

Vector de ganancias para $\kappa = 2$

$$K_y = (k_1, k_2)' = (1.414\omega, \omega^2)'$$

Vector de ganancias para $\kappa = 3$

$$K_y = (k_1, k_2, k_3)' = [2\omega, 2\omega^2, \omega^3]'$$

Vector de ganancias para $\kappa = 4$

$$K_y = (k_1, k_2, k_3, k_4)' = [2.613\omega, 3.414\omega^2, 2.613\omega^3, \omega^4]'$$

Vector de ganancias para $\kappa = 5$

$$K_y = (k_1, k_2, k_3, k_4, k_5)' = [3.236\omega, 5.236\omega^2, 5.236\omega^3, 3.236\omega^4, \omega^5]'$$

Vector de ganancias para $\kappa = 6$

$$K_y = (k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6)' \\ = [3.863\omega, 7.464\omega^2, 9.141\omega^3, 7.464\omega^4, 3.863\omega^5, \omega^6]'$$

Vector de ganancias para $\kappa = 7$

$$K_y = (k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6)' \\ = [4.493\omega, 10.097\omega^2, 14.591\omega^3, 14.591\omega^4, 10.097\omega^5, 4.493\omega^6, \omega^7]'$$

Vector de ganancias para $\kappa = 12$

$$K_y = (k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6, k_7, k_8, k_9, k_{10}, k_{11}, k_{12})' \\ = [7.661\omega, 29.347\omega^2, 74.076\omega^3, 136.874\omega^4, 194.718\omega^5, 218.468\omega^6, \\ 194.718\omega^7, 136.874\omega^8, 74.076\omega^9, 29.347\omega^{10}, 7.661\omega^{11}, \omega^{12}]'$$

