



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

**PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO
EN INGENIERÍA**

**CONTROL ÓPTIMO Y ROBUSTO
PARA UNA CLASE DE (BIO)REACTORES
MEDIANTE DETECCIÓN DE EVENTOS**

TESIS

QUE PARA OPTAR AL GRADO DE
DOCTOR EN INGENIERÍA (ELÉCTRICA)

PRESENTA

MANUEL JOSÉ BETANCUR BETANCUR

TUTOR

DR. JAIME ALBERTO MORENO PÉREZ

CIUDAD UNIVERSITARIA

MÉXICO DF

2005



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Jesús Álvarez Calderón

Secretario: Dr. Jaime A. Moreno Pérez

1^{er.} Vocal: Dr. Gerardo R. Espinosa Pérez

2^{do.} Vocal: Dr. Germán Buitrón Méndez

3^{er.} Vocal: Dr. Luis Álvarez-Icaza Longoria

1^{er.} Suplente: Dr. Alejandro Vargas Casillas

2^{do.} Suplente: Dr. Oscar Monroy Hermosillo

Lugar donde se realizó la tesis:

Instituto de Ingeniería, Ciudad Universitaria, UNAM, México DF, México

TUTOR DE TESIS

Dr. Jaime Alberto Moreno Pérez

FIRMA

AGRADECIMIENTOS Y RECONOCIMIENTOS

Agradecimientos a programas e instituciones:

Se agradece de manera especial a las siguientes instituciones por posibilitar los estudios y trabajos necesarios para el desarrollo de esta tesis:

1. Al Instituto de Ingeniería (IINGEN), a la Dirección General de Estudios de Posgrado (DGEP) y al Programa de Maestría y Doctorado en Ingeniería de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM).
2. Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) en México.
3. Al *Center for Systems Engineering and Applied Mechanics* (CESAME) de la *Université Catholique de Louvain* (UCL) en Bélgica.
4. Al programa INCO-DEV de la Comisión Europea (CE): *Thanks to the CE INCO-DEV Bursary contract ICB1-CT-2002-80006.*
5. Al gobierno Belga y su programa de polos de atracción interuniversitario: *The support of the Belgian program on Inter-University Poles of Attraction initiated by the Belgian State, Prime Minister's office for Science, Technology and Culture, is gratefully acknowledged.*
6. Se agradece la licencia para estudios doctorales otorgada por la Universidad Pontificia Bolivariana (UPB) en Colombia.

Agradecimiento y reconocimiento a proyectos:

1. Se agradece y se reconoce la importancia que para esta tesis tuvo el proyecto de cooperación internacional denominado *Efficient Operation of Urban Wastewater Treatment Plants (EOLI, 2005)*. Del mismo hace parte el Instituto de Ingeniería de la UNAM y colaboran en él personal de la coordinación de Bioprocesos Ambientales y de la coordinación de Automatización. El objetivo general de dicho proyecto es mejorar el desempeño de los procesos de tratamiento de Aguas Residuales (**AR**) mediante biorreactores discontinuos secuenciales. Dado que estos procesos biológicos posibilitan la total mineralización (*i.e.* la remoción) de los compuestos orgánicos

tóxicos, la UNAM ha enfocado su participación al estudio del Tratamiento de AR (**TAR**) contaminadas con dichos compuestos. Dicho proyecto ha requerido la participación interdisciplinaria de personas de variadas especialidades y nacionalidades, ha contado con el patrocinio de entidades nacionales y extranjeras, y ha brindando oportunidades investigativas y de estudio a todos los niveles.

This work includes results of the EOLI project that is supported by the INCO program of the European Community, Contract number ICA4-CT-2002-10012.

2. Se agradece el apoyo económico del proyecto CONACyT 34934A en México.

Reconocimientos referentes a las aplicaciones:

Se hace un reconocimiento y se agradece a las personas e instituciones que permitieron el desarrollo de las aplicaciones presentadas en este trabajo:

1. El trabajo experimental y de laboratorio necesario para llevar a cabo la validación de la estrategia de control para biorreactores propuesta en esta tesis, *i.e.* el Control de Tiempo Óptimo Dirigido por Eventos (**ED-TOC** del inglés *Event-Driven Time-Optimal Control*), en una aplicación particular al TAR contaminadas con compuestos tóxicos, fue realizado en la Coordinación de Bioprocesos Ambientales del Instituto de Ingeniería de la UNAM, por el grupo de investigación del Dr. Germán Buitrón. Todo lo referente a la operación del biorreactor y al diseño biológico del bioproceso debe agradecerse a estos expertos p.ej. la aclimatación del reactor, la preparación del AR sintética modelo, el muestreo manual de datos, las técnicas analíticas y estadísticas para el análisis (fuera de línea) y la interpretación de los mismos, etc.

De manera sinérgica la participación del grupo de trabajo del Dr. Jaime A. Moreno de la Coordinación de Automatización de ese mismo instituto, y en particular el trabajo relacionado con esta tesis, en dicho proceso fue: diseño de la estrategia **ED-TOC**; puesta a punto de la instrumentación necesaria para la captura de datos en línea y para el control del bioproceso; elaboración, prueba y puesta a punto del *software* necesario para el control y registro del estado del proceso; entrenamiento de los operadores del bioproceso en cuanto al manejo del *software* y la identificación y calibración de los parámetros necesarios para la puesta a punto de la estra-

tegia de control y, finalmente, la colaboración en el proceso experimental desde el punto de vista de modelizado y de control.

Todo lo anterior para dos reactores, un reactor de laboratorio (EOLI-UNAM-SBR-01) y otro de tamaño piloto industrial (EOLI-UNAM-SBR-02). Para este último se reconoce el trabajo de Dieter Wimberger en la configuración del sistema *input/output (I/O)* y de comunicaciones y a la empresa mexicana IBTECH, y a su personal, por la labor de diseño y construcción del reactor.

2. La segunda aplicación se realizó mediante simulaciones, durante una estancia en el CESAME, de la *Université Catholique de Louvain*, en Bélgica. Allí se tuvo la oportunidad de trabajar con el Profesor Dr. Denis Dochain y la Dra. Mariana Titica para poner a prueba la propuesta *ED-TOC* mediante la utilización de un modelo matemático previamente utilizado por ellos para validar su propuesta de la ley de control **AES** (del inglés *Adaptive Extremum-Seeking*).

Agradecimiento a personas:

1. Al Director: Dr. Jaime Alberto Moreno Pérez por sugerir siempre el reto correcto en el momento justo y por ser el catalizador del proceso personal asociado a esta tesis.
2. A los demás miembros del comité tutorial (en orden alfabético de apellido) por su tutoría acertada durante todo el trabajo conducente a esta tesis:
Dr. Germán Buitrón Méndez
Dr. Gerardo R. Espinosa Pérez
3. A los demás jurados (en orden alfabético de apellido) por la revisión de la tesis y las valiosas críticas constructivas que ayudaron a mejorar sustancialmente el texto:
Dr. Jesús Álvarez Calderón
Dr. Luis Álvarez-Icaza Longoria
Dr. Oscar Monroy Hermosillo
Dr. Alejandro Vargas Casillas
4. Se agradece de manera especial a todos las personas que participaron con su trabajo en la obtención de los resultados experimentales, desde el inicio en las prime-

ras versiones de laboratorio, y hasta el final en la planta piloto: Marie-Eve Schoeb, Alejandro Zarco, Iván Moreno-Andrade, T. David Martinez, Gloria Moreno, Alma B. Corrales, Jaime Pérez, Leonardo Jimenez, L. Rodrigo Cervantes, J. Antonio Linares, y a todo el personal estudiantil, técnico y de soporte involucrado.

5. Se agradece a Laura Mayanin Nava Vargas y a Isabelle Hissette quienes con su apoyo, desde sus secretarías en México y en Bélgica respectivamente, colaboraron de manera invaluable al bienestar personal y al eficiente desarrollo de los aspectos logísticos y cotidianos del trabajo.
6. Se agradece a la familia por creer y por desear siempre lo mejor.
7. Se agradece a todas las amistades que siempre estuvieron apoyando y animando, especialmente en los momentos más difíciles.
8. Se agradece también a todas las demás personas que de una u otra manera apoyaron y/o posibilitaron la realización de este trabajo.

Reconocimiento de responsabilidad:

La responsabilidad del aspecto científico del trabajo es del autor.

CONTENIDO

NOMENCLATURA	13
1. INTRODUCCIÓN.....	17
1.1. Los siete retos.....	19
1.2. Relevancia del tema.....	20
1.3. Estado del arte.....	22
1.4. Aportaciones propuestas	26
1.5. Organización y descripción del texto de la tesis.....	28
2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA: OPTIMALIDAD-TEMPORAL ROBUSTA	31
2.1. Modelo del proceso para operación tipo lote-alimentado	31
2.2. Optimalidad	47
2.3. Robustez	57
3. CONTROL ÓPTIMO Y ROBUSTO MEDIANTE DETECCIÓN DE EVENTOS (<i>ED-TOC</i>).....	61
3.1. <i>ED-TOC</i> nominal básico.....	61
3.2. Detector robusto de eventos con <i>software-sensors (E-SS)</i>	72
3.3. Errores y robustez de la combinación <i>E-SS & ED-TOC</i>	78
3.4. <i>E-SS</i> práctico	83
3.5. Metodología de diseño del <i>E-SS</i> práctico para el <i>ED-TOC</i>	93
4. CONTROL DEL LOTE-ALIMENTADO PARA PROCESOS DEGRADADORES DE SUSTRATO	95
4.1. Control de procesos degradadores de sustrato	95
4.2. Control de biorreactores Clase A (anaerobios) degradadores de sustrato	96
4.3. Control de biorreactores Clase B (aerobios) degradadores de sustrato.....	98
4.4. Evaluación de los siete retos: caso degradador de sustrato	108
5. CONTROL DEL LOTE-ALIMENTADO PARA PROCESOS PRODUCTORES DE BIOMASA.....	111
5.1. Alternativas para usar el <i>ED-TOC</i> en procesos productores de biomasa	111
5.2. Evaluación de los siete retos: caso productor de biomasa.....	122
6. APLICACIONES: RESULTADOS Y DISCUSIÓN	123
6.1. Aplicación experimental degradadora de sustrato: Tratamiento de AR con fenoles	123
6.2. Aplicación simulada a un proceso de producción de biomasa	136
6.3. Evaluación de las aplicaciones	140
CONCLUSIONES.....	141
ANEXO 1: Listado de ponencias en congresos.....	145
ANEXO 2: Parámetros de varios candidatos al modelo EOLI 1 (EM1)	147
ANEXO 3: Modelo del sensor de oxígeno disuelto.....	149
REFERENCIAS.....	151

Lista de Tablas

Tabla 3.1. Estados lógicos (σ) de la máquina nominal de estados finitos (Σ) <i>ED-TOC</i> ..	64
Tabla 3.2. Eventos nominales (e) de la máquina (Σ) para el <i>ED-TOC</i>	65
Tabla 3.3. <i>E-SS</i> : Detector de Eventos (de la Tabla 3.2) por <i>software</i> usando $\gamma = f(\mu_t)$...	74
Tabla 3.4. <i>E-SS</i> : Detector de Eventos por <i>software</i> práctico, usando $\gamma = f(\mu_t)$	84
Tabla 3.5. <i>E-SS</i> incluyendo verificación de redundancia temporal	91
Tabla 4.1. <i>E-SS</i> : Detector de Eventos por <i>software</i> práctico, usando $\gamma = f(\zeta)$	106
Tabla 6.1. Efecto de un pico de carga perturbador (sin pre-dilución)	133
Tabla 6.2. Incremento en carga diaria aplicable	134
Tabla 6.3. Ahorro energético en aeración	135
Tabla 6.4. Ahorro energético en agitación.....	135
Tabla 6.5. Comparación de optimalidad ante perturbaciones e incertidumbres	138
Tabla 6.6. Comparación de características de los controladores	140
Tabla 6.7. Tiempo de conmutación para el actuador <i>bang-bang</i>	140

Lista de Figuras

Figura 2.1. Diagrama de fases y tiempos de un lote típico (<i>batch</i>).	33
Figura 2.2. Secuencia básica para un lote en un reactor aerobio.	34
Figura 2.3. Diagrama de fases y tiempos del lote-alimentado (<i>fed-batch</i>).	34
Figura 2.4. Diagrama de fases y tiempos <i>ED-TOC</i>	35
Figura 2.5. Tasa específica de crecimiento de biomasa.	40
Figura 2.6. Modelo inhibitorio de crecimiento de biomasa tipo Haldane	42
Figura 2.7. Punto de meta del proceso en función de S y de μ	45
Figura 2.8. Trayectoria-SV <i>TOC</i> según la condición inicial: A) $S_0 < S^*$; B) $S_0 \geq S^*$	49
Figura 2.9. Trayectoria-SV <i>VTC</i> ($S_i > S^*$) según la condición inicial.	51
Figura 2.10. Trayectoria-SV <i>VTC</i> ($S_i < S^*$) según la condición inicial.	52
Figura 2.11. Trayectoria-SV practi-óptima	53
Figura 2.12. Zona practi-óptima. Relación entre p_{sng} y S_{min} , S_{max}	53
Figura 2.13. Zona de operación del proceso segura para la biomasa.	59
Figura 3.1. Trayectoria-SV del <i>ED-TOC</i> nominal.	61
Figura 3.2. Región casi-óptima del <i>ED-TOC</i> nominal	63
Figura 3.3. Diagrama <i>ED-TOC</i> : Máquina de Estados Finitos (Σ) nominal.	64
Figura 3.4. Esquema de la conexión entre <i>SBR</i> y <i>ED-TOC</i>	65
Figura 3.5. Trayectoria-SV del <i>ED-TOC</i> práctico ante errores (desconocidos).	71
Figura 3.6. Esquema de la conexión proceso-controlador.	73
Figura 3.7. Zona de inicio segura aún ante errores del usuario en $flag_{inhib.0}$	77
Figura 3.8. Tipos de trayectoria y de errores	80
Figura 3.9. Diagrama <i>ED-TOC</i> : Máquina de Estados Finitos (Σ) práctica.	84
Figura 4.1. Transformación para μ en el caso aerobio.	100
Figura 6.1. <i>SBR</i> de laboratorio (EOLI-UNAM-SBR-01).	124
Figura 6.2. <i>SBR</i> piloto a Escala de campo, portátil (EOLI-UNAM-SBR-02).	125
Figura 6.3. Interfaz gráfica de usuario del <i>software</i> BioReC.	126
Figura 6.4. Cinética típica de S (EOLI-UNAM-SBR-01):	131
Figura 6.5. Cinéticas típicas (EOLI-UNAM-SBR-02) del <i>OMUR</i> y <i>DO</i>	132
Figura 6.6. Comparación de t_{tanda} para perturbaciones conocidas del influente	133
Figura 6.7. Simulación del Escenario 6 de la Tabla 6.5.	139

RESUMEN

Se propuso y analizó un controlador *bang-bang* sub-óptimo, para biorreactores tipo lote-alimentado, capaz de minimizar robustamente el tiempo de procesamiento. Se resolvieron los siguientes retos prácticos: carencia de sensores de concentración de biomasa y de sustrato, dificultad para modelar matemáticamente el proceso, variabilidad paramétrica, desconocimiento de la concentración del sustrato a tratar e inhibición de la biomasa del reactor en función de la concentración de dicho sustrato.

Se usó un *software-sensor*, que usa variables fáciles de medir, para detectar los eventos que dirigen las transiciones de estado del controlador. Así se logró realizar cada reacción como una serie de mini-lotes, es decir administrando el flujo influente en pulsos *ON/OFF* controlados. De esta manera se evita alcanzar concentraciones inhibitorias y se logra una operación casi óptima, sencilla de explicar y fácil y económica de implementar. Se dedicó especial atención al aspecto teórico de la robustez, es decir seguridad y tolerancia ante perturbaciones, incertidumbres y ruidos.

Se comprobó la teoría en una aplicación de Tratamiento de Aguas Residuales tóxicas, tanto a escala de laboratorio como piloto de campo. Las únicas variables medidas fueron la concentración de oxígeno disuelto y el volumen. Comparando con el método del lote tradicional controlado por tiempos fijos se obtuvieron aumentos en la carga aplicable de 90%, ahorros energéticos de 39%, remoción del sustrato tóxico del 99% y mejoras de un orden de magnitud en la robustez a perturbaciones en la concentración tóxica (picos de carga).

También se explicó la forma de aplicar la metodología a otros casos biotecnológicos con objetivos diferentes p.ej. producir biomasa.

Palabras clave

Control óptimo, control robusto, lote-alimentado, biorreactor discontinuo secuencial, detector de eventos, tratamiento de agua residual, inhibición, tóxicos, fenoles, producción de biomasa, *bang-bang*, *software-sensor*, *SBR*.

NOMENCLATURA

En el texto se utilizan las cursivas para designar palabras de otras lenguas y también para diferenciar las variables y parámetros. Las negritas se usan para resaltar palabras p.ej. cuando su concepto está siendo definido. Un subrayado adicional las identifica como valores prácticos, inciertos y/o perturbados, *i.e.* que se diferencian del valor nominal por un valor desconocido.

Siglas y Abreviaturas

<i>AES</i>	Búsqueda adaptativa del extremo, en inglés <i>Adaptive Extremum-Seeking</i> .
AR	Agua Residual, en inglés <i>Wastewater</i> .
<i>DO</i>	Oxígeno Disuelto, en inglés <i>Dissolved Oxygen</i> .
<i>ED-TOC</i>	Control óptimo y robusto mediante detección de eventos, en inglés <i>Event Driven Time Optimal Control</i> .
<i>EOLI</i>	<i>Efficient Operation of Urban Wastewater Treatment Plants Project</i> .
<i>E-SS</i>	Detector de eventos por <i>software</i> , en inglés <i>Events Software-Sensor</i> .
<i>et al.</i>	y otros.
<i>FTC</i>	Control de tiempos fijos, en inglés <i>Fixed Timing Control</i> .
<i>i.e.</i>	<i>id est</i> ; esto es; es decir.
<i>OB-TOC</i>	Control de tiempo óptimo basado en observadores en inglés <i>Observer Based Time Optimal Control</i> .
<i>OMUR</i>	Tasa másica de consumo de oxígeno, en inglés <i>Oxygen Mass Uptake Rate</i> .
<i>OUR</i>	Tasa de consumo de oxígeno, en inglés <i>Oxygen Uptake Rate</i> .
p.ej.	por ejemplo; v.gr; <i>e.g. (exempli gratia)</i> .
PG	Producto Gaseoso.
PTAR	Planta de TAR, en inglés <i>Wastewater treatment plant</i> .
<i>SBR</i>	Reactor discontinuo secuencial, en inglés <i>Sequencing Batch Reactor</i> .
<i>SS</i>	Observador o sensor por <i>software</i> , en inglés <i>Software Sensor</i> .
TAR	Tratamiento de AR, en inglés <i>Wastewater treatment</i> .
<i>TOC</i>	Control de tiempo óptimo (mínimo), en inglés <i>Time Optimal Control</i> .
<i>vs.</i>	<i>Versus</i> ; comparado con; en contra de.
<i>VSS</i>	Sólidos suspendidos volátiles, en inglés <i>Volatile Suspended Solids</i> .
<i>VTC</i>	Control de tiempos variables, en inglés <i>Variable Timing Control</i> .

Variables

$B(gVSS)$	Biomasa total en el <i>SBR</i> ; $B = XV$.
$C(g)$	Sustrato total alimentado al <i>SBR</i> ; p.ej. $C_0 = S_0V_0$.
$E_k(h)$	Error de detección del evento que dispara la transición en el tiempo k .
e_j	Evento tipo $j=0, \dots, 5$; (Booleano).
k	tiempo discreto que marca la $k^{ésima}$ transición de estado lógico en $t = t_k$.
$O(mg/L)$	Concentración del oxígeno disuelto en el tanque del <i>SBR</i> . $0 \leq O_{mín} \leq O \leq O_{sat}$.
$Q(Lh^{-1})$	Tasa volumétrica de flujo en la entrada (variable manipulada). $0 \leq Q \leq Q_{max}$.
$q(g/g/h)$	Tasa efectiva de reacción.
$S(g/L)$	Concentración del sustrato en el tanque del <i>SBR</i> . $S \geq 0$.
$t(h)$	tiempo continuo (el inicio de la fase de llenado del <i>SBR</i> sucede en t_0).
$V(L)$	Nivel de volumen del líquido en el <i>SBR</i> . $0 \leq V_0 \leq V \leq V_f$.
$X(gVSS/L)$	Concentración de biomasa en el tanque del <i>SBR</i> . $X > 0$.
$\mu_t(h^{-1})$	Tasa específica de crecimiento de biomasa en función del tiempo t .
σ_j	Estado lógico del <i>ED-TOC</i> durante las fases de llenado y reacción: $j=0, \dots, 4$.
γ	Función medible o computable de μ .

Parámetros

$b(h^{-1})$	Tasa específica de respiración endógena.
I_b, I_μ	Índices de optimalidad.
k_1	Constante de conversión de sustrato en biomasa ($k_1 = I/Y$).
k_2	Constante de conversión de oxígeno en biomasa ($k_2 = I/Y_{X/O}$).
k_d	Constante de decaimiento de la biomasa.
k_{PG}	Coefficiente de generación de un producto gaseoso.
$k_{La}(h^{-1})$	Coefficiente másico de transferencia de oxígeno.
$K_i(g/L)$	Constante de inhibición del modelo Haldane.
$K_s(g/L)$	Constante de saturación o afinidad del modelo Haldane.
P, p	Índice y cota de conmutación.
$S^*(g/L)$	Concentración de sustrato a la cual μ es máximo.
$T_E(h)$	Tiempo de escape (desde la zona casi-óptima, hacia afuera de la robusta).
$t_k(h)$	Tiempo en el cual se produce el $k^{ésimo}$ cambio de estado lógico.
$T_c(h)$	Tiempo de conmutación del actuador práctico (real).

$T_k(h)$	Duración del $k^{\text{ésimo}}$ segmento de la trayectoria del estado continuo.
$T_T(h)$	Tiempo de travesía de un lado de la zona casi-óptima al otro (cruzándola).
$T_s(h)$	Margen de tiempo para la estabilización de señales.
$T_{sv}(h)$	Margen de tiempo combinado (T_s+T_v) que robustifica la detección de eventos.
$t_v(h)$	Tiempo que tarda una tanda o ciclo completo en un <i>SBR</i> , sin incluir el tiempo muerto.
$T_v(h)$	Margen de tiempo durante el que se permite violar la cota de una perturbación o ruido sin que esto afecte el funcionamiento del control.
$\mu(h^{-1})$	Modelo de la tasa específica de crecimiento de biomasa en función de S .
$\mu^*(h^{-1})$	Máxima tasa específica de crecimiento de biomasa.
$\mu_o(h^{-1})$	Coefficiente de la tasa específica de crecimiento de biomasa tipo Haldane.

Subíndices

0	Valor inicial, justo antes de iniciar el llenado del tanque del reactor en $t = t_0$.
<i>eq</i>	Condición de equilibrio.
<i>f</i>	Final o terminal <i>i.e.</i> cuando se cumple el criterio de terminación de la reacción, que no necesariamente coincide con el criterio de meta del proceso.
<i>i</i>	Influente o entrada (en inglés <i>input</i>).
<i>k</i>	Contador de transiciones de estado.
<i>mp</i>	Meta principal del proceso.
<i>opt</i>	Óptimo.
<i>PG</i>	Producto gaseoso.
<i>sat</i>	Saturación.
<i>sgr</i>	Seguridad.
<i>sng</i>	Singular, o asociado/a a la vecindad de la porción singular de la trayectoria óptima <i>i.e.</i> el arco singular.
∞	Valor límite de la tendencia en tiempo infinito.

1. INTRODUCCIÓN

La motivación original de esta tesis es ofrecer resultados que permitan mejorar el desempeño de los procesos de tratamiento de Aguas Residuales (**AR**) mediante biorreactores discontinuos secuenciales. Dado que estos procesos biológicos posibilitan la total mineralización de los compuestos orgánicos tóxicos, se ha prestado especial atención al estudio del problema de control óptimo de biorreactores para el Tratamiento de AR (**TAR**) contaminada con dichos compuestos. Se busca aumentar el factor de utilización de estos sistemas, reducir su consumo energético, aumentar la seguridad en su operación y superar las limitaciones actuales en cuanto a medición de variables primarias del proceso.

Existen multitud de tipos de biorreactores. En general estos se componen de un tanque que permite poner en contacto un flujo de entrada (**influyente**), el cual contiene el reactivo principal a ser procesado (**sustrato**), con un consorcio de microorganismos (**biomasa**). El sustrato es transformado por la biorreacción y por tanto ya no estará presente, al menos no de manera importante, en el flujo de salida (**efluente**) del sistema.

Se estudiará aquí una fracción de la familia de los biorreactores discontinuos. Estos trabajan por tandas y en consecuencia se diferencian de los biorreactores en continuo porque su flujo de entrada y salida no es permanente, sino cíclico. Desde el punto de vista del control, los reactores en continuo requieren alcanzar un estado estable, incluyendo un equilibrio entre el influyente y el efluente, por lo cual la dinámica del proceso biológico se desarrolla principalmente en el espacio, sin variaciones temporales importantes. En cambio en los reactores discontinuos se buscan, en general, variaciones dinámicas cíclicas controladas en el tiempo. Por tanto, el fenómeno biológico se desarrolla homogéneamente en todo el espacio volumétrico del reactor, pero variando en el tiempo.

Para el caso del TAR de origen industrial contaminadas con compuestos orgánicos tóxicos existen diversas alternativas. Por su flexibilidad, eficiencia y su potencial resistencia para tratar dichos tóxicos (Ellis *et al.*, 1996), se dedicará este estudio a los biorreactores discontinuos. El efluente industrial (AR) a tratar se constituye en el influyente

del biorreactor, y el tóxico contenido en él se constituye en el sustrato a ser procesado. Dicho proceso lo realiza la biomasa que reside permanentemente en el tanque del reactor. Para su correcto funcionamiento dicha biomasa requiere una previa aclimatación al tóxico particular y requiere también condiciones apropiadas para metabolizarlo y mineralizarlo p.ej. valores correctos de temperatura, pH, oxígeno, etc. El tóxico es así removido del medio líquido y por tanto ya no estará presente en el efluente del reactor, el cual se constituye en el producto deseado del proceso *i.e.* agua tratada.

El problema principal, para este trabajo, del TAR en un biorreactor es causado por el fenómeno no lineal de **inhibición** de la biomasa en presencia de tóxicos. Dicho fenómeno altera el comportamiento de la reacción de forma no monótona. Adicionalmente su modelo es fuente de incertidumbres dado que presenta alta variabilidad (Ellis *et al.*, 1996). La inhibición disminuye la actividad de la biomasa e incluso, si la concentración del tóxico supera ciertos límites, puede conducir a la inutilización del reactor por una pérdida permanente de su actividad (Buitrón *et al.*, 2003; Coello *et al.*, 2003).

Puesto que los procesos biológicos que se pueden desarrollar en un reactor tienen principios fundamentales similares, independiente de si la aplicación se orienta a un bioproceso ambiental (p.ej. TAR) o a un proceso biotecnológico industrial (p.ej. producción de biomasa), soluciones como las sugeridas en esta tesis encuentran cabida en una variada clase de aplicaciones diferentes, en especial cuando la biomasa utilizada exhibe comportamientos inhibitorios ante el sustrato procesado.

El lote es la forma típica de operación del reactor discontinuo. Usualmente utiliza una secuencia de tratamiento con Control por Tiempos Fijos (**FTC** del inglés *Fixed Time Control*) para cada fase de la tanda, a saber: Llenado, Reacción, Sedimentación, Vaciado y posiblemente un Tiempo-Muerto adicional, opcional, antes de iniciar otra tanda. La secuencia de fases es sencilla y requiere una mínima instrumentación para el temporizado y para controlar el nivel del tanque. Las condiciones de diseño apropiadas para que el reactor opere correctamente en este modo de operación se denominarán, en adelante, como las condiciones **estándar**.

Aunque la operación del lote en modo *FTC* es sencilla, dista de ser la más eficiente y, además, presenta desventajas cuando una perturbación en la concentración del

tóxico a tratar supera los límites estándar previstos en el diseño. Entonces el tiempo de reacción preasignado (estándar) no es suficiente para completar el tratamiento o, peor aún, si la concentración resulta ser un **pico de carga** (en inglés *shock load*) fuerte, puede disminuir la viabilidad de la biomasa, imposibilitando prácticamente el tratamiento de esa tanda y de las siguientes.

Una posible solución a este problema consiste en regular el influente de modo que las fases de reacción y llenado se realicen simultáneamente a modo de lote-alimentado (en inglés *fed-batch*), y manipular el llenado de manera tal que la concentración del sustrato dentro del reactor nunca alcance valores inhibitorios importantes. Es más, si dicha concentración interna se mantiene suficientemente cerca de aquella máxima concentración que aún no produce inhibición, entonces el tratamiento de la tanda se realizará en tiempo mínimo. El problema tecnológico consiste en la carencia de sensores efectivos para medir las concentraciones de sustrato y de biomasa en línea. También es problemático identificar con certeza el valor límite de sustrato que inicia la inhibición y, en general, identificar los parámetros biológicos del modelo matemático del proceso.

En el caso contrario, cuando la concentración del tóxico a tratar resulta ser menor a la estándar, el *FTC* desperdicia tiempo y energía, pues la reacción termina mucho antes de agotar el tiempo límite previsto. Aún así se sigue esperando, agitando y aereando innecesariamente. Por tanto, una estrategia de control que incluya un método para determinar el final de la reacción permitirá reducir el tiempo de tratamiento efectivo incluso para concentraciones del influente perturbadas a la baja. Detectar con certeza dicha condición final de la reacción permitiría, adicionalmente, controlar el tiempo de ayuno, *i.e.* el tiempo que permanecerá la biomasa sin contacto con nuevo sustrato y que puede resultar perjudicial si se prolonga demasiado (Buitrón y Moreno 2002; Coello *et al.*, 2003).

1.1. Los siete retos

Los problemas mencionados, según las consideraciones planteadas en el anteproyecto del trabajo doctoral, pueden resumirse en los siguientes siete retos:

- Reto 1. Manipular exclusivamente la forma de llenado del reactor para lograr procesar cada tanda en un tiempo práctico cercano al mínimo teóricamente posible *i.e.* lograr una Optimalidad-Temporal práctica de la operación.
- Reto 2. Establecer un criterio de finalización *i.e.* detectar automáticamente en qué momento la reacción ha cumplido ya su objetivo fundamental.
- Reto 3. Paliar la carencia de medida de concentraciones de biomasa y de sustrato en el reactor (lo que complica solucionar el Reto 1 y el Reto 2). Deben usarse únicamente las mediciones disponibles para las cuales existan sensores económicos, confiables y fáciles de operar y mantener *i.e.* tecnológica y comercialmente maduros.
- Reto 4. Lograr robustez del control ante perturbaciones en la concentración del sustrato en el influente *i.e.* la degradación del desempeño del proceso debe ser nula, o a lo sumo poca y gradual, a medida que el valor de dicha concentración se aleja de las condiciones estándar. Especialmente debe lograrse una operación segura ante picos de carga.
- Reto 5. Paliar la carencia de mediciones de la concentración del sustrato en el influente (esto complica solucionar el Reto 1 y el Reto 4).
- Reto 6. Considerar la incertidumbre estructural del modelo inhibitorio de crecimiento de la biomasa (esto complica solucionar el Reto 1 y el Reto 4).
- Reto 7. Lograr robustez del control ante la incertidumbre paramétrica del modelo dinámico general de la reacción (esto complica solucionar el Reto 1 y el Reto 4).

Los capítulos siguientes se dedicarán a explicar la solución de estos retos mediante una estrategia de control automático.

1.2. Relevancia del tema

Ecológicamente el problema del vertimiento industrial de AR contaminadas con compuestos orgánicos tóxicos es de importancia primordial. El uso de bioreactores representa una importante opción, entre varias otras (Gupta *et al.* 1998), para atacarlo.

Para ilustrar los resultados generales de esta tesis se utilizará, en una de las aplicaciones particulares propuestas, un tóxico modelo perteneciente a la familia de los fenoles. Este fue seleccionado pues los compuestos de dicha familia de tóxicos representan un caso relevante dado que, aún en ínfimas concentraciones, dan mal sabor y mal olor al agua y ponen en riesgo la salud pública, pudiendo incluso acelerar la formación de tumores (Gupta *et al.* 1998). Por tal razón es imperativo evitar que las AR contaminadas con tóxicos de tal clase sean vertidas, sin tratar, a los cuerpos de agua.

Las concentraciones típicas de los fenoles están en el rango de 35 a 400 mg/L en las AR de las industrias farmacéutica, electroplateado, fabricación de papel y fundiciones de hierro (Chen *et al.*, 1997). Otras industrias que también desechan fenoles son la química, la petroquímica, y las productoras de desinfectantes, pesticidas, herbicidas y fungicidas (Watanabe *et al.* 1996). En algunas AR petroquímicas específicas la concentración de fenoles totales puede alcanzar picos de carga de 50000 mg/L (Olguín-Lora *et al.*, 2003). p.ej. Olmos *et al.* (2004) caracterizaron, para la refinería mexicana de Tula, la cual procesa el 24.4 % del crudo en el país y que produce 14 m³/d de sosas gastadas, la composición de dichas sosas. Concluyen que son de la clase fenólica, que contienen en promedio 30600 mg/L de fenol con una alta variabilidad (desv. estándar 27400 mg/L), y sugieren una forma de neutralización y dilución que permitiría tratarlas biológicamente en vez de recurrir a los actuales métodos que involucran la incineración.

Considerando que una concentración de apenas 20 mg/L afecta ya la actividad enzimática e impide la respiración bacteriana, y que valores mayores ponen en riesgo la viabilidad celular, es importante investigar la manera de evitar estos y otros posibles daños, p.ej. destrucción de flóculos (Galil *et al.*, 1998), a las Plantas de TAR (**PTAR**) que tratan dichas AR tóxicas. La variabilidad que genera los picos de carga puede aparecer también en AR que normalmente contengan valores menores del tóxico pero que, en ocasiones, por accidente o por lavado de tanques u otras operaciones intermitentes, su concentración pueda incrementarse considerablemente, así sea solamente durante períodos cortos de tiempo. Esto hace necesario el desarrollo de un sistema capaz de enfrentar robustamente este tipo de perturbaciones variables (no medibles) y, simultáneamente, capaz de minimizar los tiempos de tratamiento para optimizar así el desempeño de las PTAR y hacerlas competitivas con otros métodos de tratamiento *i.e.* permi-

tir mayor carga de agua diaria a tratar, reducir la energía consumida durante el tratamiento, y reducir el tamaño y costo del reactor. La relevancia del asunto es por tanto también económica, además de ecológica, y tiene alcance internacional, pues tanto los contaminantes como los costos asociados a su vertimiento, en el largo plazo, no conocen fronteras.

Otras aplicaciones que usan biorreactores, p.ej. procesos biotecnológicos industriales de fermentación para producir enzimas o antibióticos, comparten algunos de los retos aunque al mismo tiempo tengan objetivos fundamentales de proceso diferentes:

- En un proceso para la producción de biomasa, p.ej. levadura (en inglés *baker's yeast*), se desea aumentar al máximo la biomasa dentro del reactor en cada tanda dado que esta biomasa tiene un alto valor agregado, mientras que en una PTAR es lo contrario puesto que la biomasa en exceso es un subproducto indeseable que requiere tratamiento adicional para su disposición final.
- En procesos para la producción de biomasa el sustrato del influente está bien caracterizado y su concentración es conocida, mientras que en una PTAR su caracterización es pobre y la concentración altamente incierta.
- En procesos para la producción de biomasa la relación costo/beneficio del proceso permite utilizar sensores en línea así sean costosos y/o delicados y permite contar con operadores calificados para su uso, mientras que en una PTAR cualquier posible inversión es usualmente vista como un gasto de difícil justificación.

Sin embargo, si la estructura de sus modelos matemáticos es similar, al brindar solución a los siete retos se puede resolver también el problema general de una clase de aplicaciones biotecnológicas similares, más allá del área de las PTAR y los bioprocesos ambientales, satisfaciendo siempre primero los objetivos fundamentales y restricciones de cada proceso particular.

1.3. Estado del arte

Para el caso de las PTAR, un biorreactor en continuo puede tratar de manera regular concentraciones tóxicas del orden de 10 mg/L (Ellis *et al.*, 1996). Por encima de

ese valor se compromete su viabilidad. Una primera solución al problema de los picos de carga (Reto 4 y Reto 5) consiste en instalar tanques previos de igualación. Pero para tanques de tamaño y costo razonable existe aún el riesgo eventual de infringir los límites de diseño al resultar, esporádicamente, insuficiente su capacidad igualadora. El advenimiento de los bioprocesos discontinuos ha permitido tratar concentraciones un orden y medio de magnitud superior. Buitrón *et al.* (2003), p.ej., especificaron el proceso de aclimatación y operación de un **SBR** (del inglés *Sequencing Batch Reactor*), con biomasa suspendida (dispersa en el medio líquido), apto para tratar una concentración de hasta 350 mg/L de 4-clorofenol (**4CF**) como condición estándar. Picos de carga hasta el doble de éste estándar pueden aún tratarse, pero la inhibición resulta ya considerable y, si no se incrementa el tiempo de reacción por encima del estándar, la mineralización no se completará. Picos mayores a 1050 mg4CF/L inutilizan al **SBR** (Buitrón *et al.*, 2005). Para solucionar el problema de asignación de un tiempo justo a la fase de reacción (Reto 2 y Reto 3) Buitrón *et al.* (2004) propusieron una estrategia de tiempos variables (**VTC** del inglés *Variable Time Control*) usando la concentración del oxígeno disuelto en el medio líquido como indicador de terminación de la reacción. Pero ni la **FTC** ni la **VTC** se ocupan del problema de minimizar el tiempo de reacción (Reto 1). Su ineficiencia aumenta rápida y no linealmente con incrementos de la concentración del influente (Reto 4) hasta que el sistema resulta inoperante.

Respecto a la optimización muchos resultados útiles han sido obtenidos utilizando un modelo general de la estructura del problema (Modak *et al.*, 1986). Un resultado clave en biotecnología es que, en muchos casos, la razón de la cantidad de producto formado entre la cantidad de sustrato consumido (*i.e.* tasa de producción) puede maximizarse simplemente con maximizar la tasa de conversión instantánea. Por tanto es posible encontrar la mejor política de llenado del reactor mediante la utilización de la teoría de control óptimo (Moreno, 1999; Sarkar y Modak, 2003; Smets *et al.*, 2002). Un controlador exacto de Tiempo Óptimo (**TOC** del inglés *Time Optimal Control*) que manipule el llenado (Reto 1) de modo que la concentración de sustrato en el reactor obligue a la tasa de conversión instantánea a tomar su máximo valor, puede describirse mediante una ley de control realimentado. Pero, para implementarla, se requiere conocer el modelo matemático del proceso perfectamente, *i.e.* tanto estructura como parámetros, y también medir todas las variables importantes de proceso *i.e.* concentracio-

nes, nivel de líquido y flujo de entrada. En muchas aplicaciones estas dos condiciones son muy restrictivas: un modelo perfecto es irrealista (Reto 6 y Reto 7) y, en biotecnología tanto como en bioprocesos ambientales (p.ej. PTAR), es o imposible o muy costoso medir todas las variables (Reto 3 y Reto 5). Un incumplimiento en estas condiciones puede conllevar a la aparición del efecto que Chang (2003) denomina **bola de nieve** (en inglés *Snowball*). Sucede cuando el sustrato alimentado al reactor por unidad de tiempo es superior al que puede ser tratado en esa misma unidad de tiempo y, por tanto, este se acumula en el tanque del reactor. Al hacerlo aumenta su concentración y aparece el efecto inhibitorio de la biomasa. Al estar inhibida la biomasa pierde capacidad de procesar el sustrato tan rápidamente como antes, y esto facilita por tanto que se acumule aún más el sustrato que sigue llegando, lo cual a su vez produce una mayor inhibición y así sucesivamente. Permitir este efecto es indeseable si se desea optimizar.

Para enfrentar las incertidumbres paramétricas (Reto 7) se han sugerido en la literatura diversas aproximaciones robustas. Normalmente un algoritmo adaptativo identifica los parámetros del modelo del proceso, cuya estructura se supone perfectamente conocida (Reto 6), y adapta en consecuencia la estrategia de control (Bastin y Dochain, 1990; Van Impe, 1998; Van Impe y Bastin, 1995). También han sido estudiadas, en teoría y mediante simulación, estrategias de búsqueda del extremo (en inglés *Extremum Seeking*) para reactores en continuo (Ariyur y Krstic, 2003; Marcos *et al.* 2004). En el caso estudiado por los primeros fue posible obtener un tiempo de convergencia equivalente a 27 veces la constante de tiempo del proceso pero sus simulaciones advierten de los riesgos de estabilidad al intentar reducirlo. Dicho tiempo de convergencia no resulta problemático para un sistema en continuo pues su horizonte de tiempo es infinito pero, para un proceso discontinuo con horizonte de tiempo finito, puede resultar excesivo p.ej. la tanda podría terminar antes de lograr la convergencia. Para llevar esa metodología al caso discontinuo, Titica *et al.* (2003) han sugerido la adición de mecanismos adaptativos, pero requieren la medición de la concentración del sustrato (Reto 3) para poder buscar, asintóticamente, un estado óptimo estable de operación. Dado un límite al horizonte de tiempo en un biorreactor discontinuo, una solución asintótica, que no pueda garantizar un tiempo de convergencia despreciable, está en desventaja. Otra limitante es que, en vez del flujo de entrada, manipulan la **dilución** (flujo/volumen) y, dado que su prueba de estabilidad y convergencia requiere un horizonte

de tiempo infinito, deben suponer que el flujo no está acotado. Adicionalmente requieren insertar una señal perturbadora de excitación persistente en el flujo, la cual debe tener características que dependen de la estructura y de los parámetros del proceso, para que la estrategia pueda utilizar adecuadamente la información generada por dicha perturbación. El mismo caso de simulación presentado por ellos será analizado en la sub-sección 6.2.3 de manera comparativa (Betancur *et al.*, 2004b).

Para atacar el Reto 3 y el Reto 5 (carencia de mediciones), y frente a los antecedentes explicados en el párrafo precedente, al plantear la tesis en 2001 una cuestión esencial parecía ser la siguiente: ¿Cómo monitorear las concentraciones de productos y reactivos, y eventualmente, algunos parámetros relevantes del proceso, tales como las tasas de reacción, de una manera efectiva y económicamente viable, de modo que el control del sistema pueda realizarse de manera óptima y robusta? Una posible respuesta consistía en utilizar el conocimiento sobre el modelo matemático del proceso, en conjunto con la medición de variables auxiliares fáciles de determinar en línea, para realizar estimaciones de las variables y parámetros de interés en la operación del reactor. Dicha idea de usar observadores no es nueva y se conoce en la práctica del control como sensores por *software* (**SS** del inglés *Software-Sensors*). Moreno y Buitrón (1998) presentaron una alternativa para implementar el *TOC* basado en un observador (**OB-TOC** del inglés *Observer Based Time Optimal Control*). El objetivo consiste en regular el sustrato utilizando un *SS* para estimar su concentración, a partir de medidas del Oxígeno Disuelto (**DO** del inglés *Dissolved Oxygen*). La idea es especialmente atractiva porque a la fecha se puede considerar que los sensores de la concentración del *DO* han alcanzado su madurez tecnológica y comercial (Ingildsen, 2002). Sin embargo la dependencia del *SS* con respecto a la mayoría de los parámetros del modelo no contribuye a su robustez cuando existen incertidumbres, que es el caso especialmente para los parámetros cinéticos y para las tasas de conversión. Vargas *et al.* (2000) aplicaron ya esa idea al caso PTAR, utilizando para el *SS* un Filtro de Kalman Extendido, con resultados mejores que los del *VTC* pero todavía limitados por las incertidumbres de los parámetros del modelo y por la necesidad de caracterizar adecuadamente el influente. La máxima concentración tratable con la *OB-TOC*, siempre y cuando su valor fuese conocido por el *SS*, fue de 1400 mg/L (Buitrón *et al.*, 2005).

Otras alternativas de control automático ofrecidas a problemas similares incluyen: Lazos de control P+I (Proporcional más Integral) en cascada (Srinivasan *et al.*, 2002) suponiendo que las concentraciones, tanto de la biomasa como del sustrato, son medibles; Redes Neuronales (Chaudhuri y Modak, 1997), usando datos fuera de línea para entrenar la red y prediseñar el perfil óptimo de llenado; Algoritmos Genéticos (Ronen *et al.*, 2002) para optimización interactiva (simulado); Pörtner *et al.* (2004) hacen una evaluación comparativa de diferentes estrategias, incluyendo desde el llenado con trayectoria predefinida (en lazo abierto) hasta controles adaptativos basados en la tasa de consumo de oxígeno (**OUR** del inglés *Oxygen Uptake Rate*) y dan recomendaciones de selección y aplicación.

A la fecha no se conocen reportes de otras alternativas que utilicen teoría de control para resolver los mismos retos en el caso específico de PTAR, ni a nivel teórico, ni de laboratorio, ni a escala industrial. Por supuesto existen trabajos que proponen métodos diferentes para enfrentar partes del problema p.ej.: la división *SenseNET* del proyecto *Bio-wise* (2004), de la *DTI (Department of Trade and Industry)* en el Reino Unido (*UK*), busca desarrollar paneles de sensores bio-luminiscentes que, instalados aguas arriba, puedan alertar de toxicidades excepcionales en el influente; también se ha propuesto usar biomasa compuesta de cepas puras, genéticamente diseñadas para soportar picos de carga de tóxicos específicos (Eichner *et al.*, 1999); otra propuesta es utilizar biomasa en gránulos (Tay *et al.*, 2004), o fija y/o también fijada a un lecho móvil (Buitrón *et al.*, 2004), pues si, en lugar de flóculos suspendidos, la biomasa se reagrupa en torno a un soporte, esta adquiere mayor resistencia a perturbaciones del influente. Estos métodos alternativos no son competidores contra las soluciones provistas por la teoría de control. Por el contrario, una vez estén desarrollados, serán complementos valiosos para mejorar la seguridad y eficiencia del proceso, lo cual es su objetivo común.

1.4. Aportaciones propuestas

La tesis propuesta apunta a solucionar los siete retos planteados mediante la utilización del control automático para la manipulación del flujo de alimentación del biorreactor. Especial énfasis se hará a la minimización del tiempo necesario de procesamiento y a la robustez del control ante incertidumbres paramétricas y estructurales del

modelo del proceso. Dichos retos son ya suficientemente relevantes para el caso PTAR. No obstante, para dar generalidad a la tesis, se extiende el alcance de la propuesta de solución a una clase de bio-sistemas. Se incluye un caso genérico del área biotecnológica, la producción de biomasa, para ilustrar así la aplicabilidad de la solución propuesta en un dominio con objetivos bien diferentes de aquel que motivó originalmente al proyecto.

En la medida en que el trabajo se empezó a desarrollar, continuando los pasos de Vargas *et al.* (2000), y que se efectuó la simulación y posterior experimentación en laboratorio usando un *SS*, se encontraron dificultades durante su aplicación práctica, en el laboratorio, al implementar el *TOC* para el caso PTAR. Al mismo tiempo que se iban atacando dichas dificultades se desarrolló una alternativa, nueva y original, para generar conocimiento parcial sobre el estado del proceso biológico, específicamente detectar cuándo la tasa de reacción del sustrato se encuentra en cercanías de su máximo valor instantáneo utilizando únicamente las variables medibles en línea y un par de parámetros. Esto se hizo a pesar de que ambos valores permanecían desconocidos, el del sustrato y el de la tasa. En ese sentido tal procedimiento para generar información se asimilaría a un *SS*, pero es diferente y completamente novedoso comparado con el concepto convencional, pues no estima variables continuas (p.ej. concentración del sustrato) sino que detecta eventos binarios (p.ej. ¿hay inhibición?). Por tal razón a ese algoritmo se le asignó el nombre de Detector de Eventos por *Software* (**E-SS** del inglés *Events Software-Sensor*). Se mostrará en este texto que dichos eventos son suficientes para implementar robusta y prácticamente un control óptimo del proceso, utilizando pulsos *ON/OFF* del influente (**bang-bang**). De allí proviene el nombre asignado, en las diversas publicaciones realizadas a la fecha, a la ley de control propuesta: Control de Tiempo Óptimo Dirigido por Eventos (**ED-TOC** del inglés *Event-Driven Time-Optimal Control*).

El cambio de paradigma propuesto con respecto al estado del arte consiste en que, en vez de intentar estimar los valores dinámicos de concentraciones de sustrato y valores de los parámetros del modelo, se detectan los eventos relacionados con la cercanía de las tasas de reacción a su valor máximo. Esta forma original de resolver el

problema brinda por tanto mayor posibilidad de aplicación práctica y se constituye en la aportación principal de la tesis.

Adicional al aspecto teórico y académico se ofrece también como aportación una solicitud de patente para la metodología. Se desarrolló el respectivo *software* de aplicación, denominado **BioReC**, el cual ha validado cumplir con los siete retos mediante los resultados exitosos de su aplicación al caso de PTAR.

Es de anotar que a las aportaciones se les ha realizado difusión de diversas maneras: una solicitud de patente ante el Instituto Mexicano de la Propiedad Industrial (Moreno *et al.*, 2004), tres publicaciones internacionales en revistas indexadas (Betancur *et al.*, en prensa 2005a; Moreno *et al.*, aceptado 2005; Moreno-Andrade *et al.*, en prensa 2005), quince ponencias en congresos (Anexo 1) e informes del proyecto *EOLI* (2005).

1.5. Organización y descripción del texto de la tesis

Lo interdisciplinario del tema sugiere que, para lograr un balance útil para un público lector de áreas diferentes al control, las explicaciones brindadas en este texto se realicen apartándose del modelo formal tradicional teorema-demostración-lema. En cambio se usará una escritura menos formal, aunque no menos rigurosa, que combina las ecuaciones y los conceptos de control con texto que describe el sentido físico y práctico de los mismos. Para las explicaciones se usarán los siguientes objetos:

Retos: plantean los problemas que requieren solución, mediante el control automático, y las limitaciones prácticas que deben afrontarse;

Condiciones: estipulan qué relaciones y restricciones deben satisfacerse para lograr un objetivo dado o para solucionar un Reto;

Supuestos: son una clase particular de condición que se asume se verifica *a priori*, como una condición natural del problema;

Resultados: conceptos, criterios y fórmulas generales que resultan del análisis del problema y que pueden usarse para solucionar los Retos;

Criterios: son una clase particular de resultados o de condiciones, que encuentran aplicación particular y directa en el proceso de diseño del controlador.

El Capítulo 2 se dedica al modelo matemático de la clase de sistemas a estudiar y a la definición de medidas de robustez en relación a la optimalidad temporal y a la seguridad del proceso. El Capítulo 3 explica la esencia del *ED-TOC* nominal y de su detector de eventos. Posteriormente se explica la forma práctica de su implementación y se analiza su robustez. El Capítulo 4 analiza la aplicación del *ED-TOC* a una clase de biorreactores, los degradadores de sustrato, la cual incluye las PTAR. Allí se asume un supuesto simplificador del problema de detección, *i.e.* que la biomasa total crece lentamente y se puede considerar casi constante, lo cual facilita resolver los siete retos. Se muestran las condiciones bajo las cuales la robustez y la optimalidad temporal del control pueden garantizarse. Para los reactores aerobios se introduce allí el concepto de la Tasa Másica de Consumo de Oxígeno (**OMUR** del inglés *Oxygen Mass Uptake Rate*), la cual es computable en línea a partir de mediciones del *DO* y que se usa para la detección de los eventos que dirigen al *ED-TOC*. El Capítulo 5 extiende el diseño del *ED-TOC* a la familia de procesos que producen biomasa en cantidad no despreciable *i.e.* eliminando el supuesto simplificador. El Capítulo 6 presenta los resultados y la discusión de la validación experimental del *ED-TOC* mediante una aplicación de laboratorio, incluyendo la comprobación del supuesto simplificador. Se estudia también una aplicación simulada de producción de biomasa, donde se usa la tasa de generación de un producto gaseoso para detectar los eventos. Para finalizar se proponen las Conclusiones y se listan las Referencias.

En la sección de NOMENCLATURA (pág. 13) se describen los acrónimos comunes y las convenciones usadas a lo largo del documento en el texto, subíndices, variables y parámetros.

2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA: OPTIMALIDAD-TEMPORAL ROBUSTA

En este capítulo se explicará conceptualmente el funcionamiento de la clase de biorreactores estudiados en la tesis y se presentará el modelo matemático del proceso del reactor durante las fases de llenado y de reacción, que resultan ser las únicas fases de interés en este estudio. Posteriormente se formalizará el problema de control óptimo en el sentido de minimizar el tiempo que tarda el proceso en alcanzar su meta. Se definirá también el concepto de Optimalidad Robusta asociado a la capacidad del controlador para lograr la optimalidad práctica del proceso aún en presencia de incertidumbres y perturbaciones, y el de Seguridad Robusta asociado a la capacidad de evitar que el efecto bola de nieve genere fallos en el proceso.

2.1. Modelo del proceso para operación tipo lote-alimentado

2.1.1. Descripción del proceso de reacción y sus metas

Se dice que un **reactivo** (o un sustrato) es **limitante** cuando la presencia de dicho compuesto (o elemento) es necesaria para llevar a cabo un proceso de reacción dado, tal que la velocidad máxima a la que la reacción podría desarrollarse es función de la concentración del mismo. Consecuentemente se define una condición **no limitante** del reactivo cuando se garantiza que este siempre se encontrará en cantidad suficiente para ignorar su efecto limitador.

Una **reacción** en un biorreactor discontinuo, en el cual se desarrolle el **proceso** de un único sustrato limitante por parte de una biomasa homogénea (o que en su defecto pueda ser modelizado de manera aproximada como tal), consiste en que, estando la biomasa en contacto con el sustrato (que se introduce al reactor vía el flujo de entrada), esta lo transforme. La **meta del proceso** de transformación puede ser diferente (y múltiple) según cada aplicación, p.ej. puede ser producir más biomasa (a partir del sustrato agregado), o eliminar el sustrato presente en el medio líquido (p.ej. el caso de tóxicos), o quizás convertirlo en un subproducto útil o en un producto gaseoso.

Para lograr que la meta del proceso se lleve a cabo, en cada tanda, es necesario que la biomasa sea del tipo adecuado al sustrato que se desea tratar y que las concen-

traciones de ambos, y también todos los parámetros relevantes, estén acordes a los criterios del diseño biológico estándar del proceso. En caso contrario se dice que el sistema se encuentra en modo de falla, lo cual no es deseable. Por tal razón es posible que antes de iniciar, o durante, cada tanda sea necesario, al menos esporádicamente, realizar operaciones de puesta a punto del reactor, p.ej. inocular nueva biomasa o, por el contrario (dependiendo de la aplicación), purgar excesos de biomasa producida en la tanda anterior, controlar el pH, adicionar reactivos necesarios para que no se den condiciones limitantes (p.ej. oxígeno para una reacción aerobia), etc.

2.1.2. Descripción de las fases en un reactor discontinuo

Aparte de las importantes operaciones de puesta a punto que mantienen al reactor en condiciones operacionales, el funcionamiento de cada lote puede describirse por una serie finita de fases bien definidas en el tiempo, siendo las básicas las enumeradas a continuación:

- 1) **Llenado:** el influente, flujo de entrada líquido que contiene al sustrato, es bombeado al interior del tanque del reactor.
- 2) **Reacción:** interacción de la biomasa con el sustrato.
- 3) **Sedimentación:** lapso de quietud del líquido en el tanque, para permitir que los sedimentos sólidos converjan al fondo del tanque.
- 4) **Vaciado:** extracción del sobre-nadante líquido, constituyéndose en el efluente o flujo de salida del reactor. Nota: en este contexto la **decantación** se define como la combinación de la sedimentación y el vaciado.
- 5) **Tiempo muerto:** Una fase de espera adicional que puede existir entre un lote y el siguiente. Según el tipo de reacción cada fase puede ir acompañada de operaciones de puesta a punto adicionales p.ej., para procesos aerobios, la agitación y/o aeración.

Wilderer *et al.* (2001) ofrecen un concepto del reactor discontinuo secuencial (**SBR** del inglés *Sequencing Batch Reactor*) que lo caracteriza por tener un funcionamiento con fases de carga (llenado) y descarga (vaciado) cíclicas, con una serie de fa-

ses intermedias caracterizadas por su alta flexibilidad de concatenación y concurrencia. También porque las concentraciones de los productos y reactivos en el tanque varían principalmente en el tiempo y no en el espacio. Por tanto esta definición cobija todos los casos de interés para este estudio y, en adelante, se usará su sigla (*SBR*) para referirse genéricamente al biorreactor discontinuo y su progresión de fases, independiente de la modalidad de secuenciación y de llenado que se utilice.

Definición 2.1. Una tanda inicia cuando comienza el llenado (t_0) y termina al finalizar el vaciado (t_v). La fase de reacción termina en el momento (t_f) en que inicia la sedimentación. La meta del proceso de reacción se cumple en un tiempo t_{mp} .

Condición 2.1. La meta del proceso de reacción se debe cumplir en un tiempo menor o igual al del término de la fase de reacción. Por tanto los tiempos de la Definición 2.1 han de cumplir que $t_0 < t_{mp} \leq t_f < t_v$.

La forma en que se controla la secuencia de fases de una tanda en un *SBR* puede recibir un nombre propio. Por ejemplo en la Figura 2.1 se describe la secuencia conocida tradicionalmente como **lote** (en inglés *batch*) en la cual las fases son independientes y consecutivas. Generalmente se alimenta con un flujo no regulado (*ON/OFF*) y suficientemente grande como para que la duración de la fase de llenado sea corta en comparación a la de reacción. Por tal razón, en ocasiones, se desprecia el efecto que pueda tener la reacción durante ese llenado. Para pasar de una fase a otra se utiliza usualmente un temporizador *i.e.* *FTC*, aunque también podrían existir otros criterios p.ej. *VTC*.

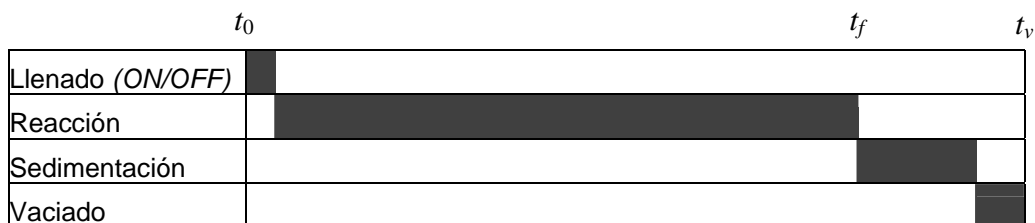


Figura 2.1. Diagrama de fases y tiempos de un lote típico (*batch*).

Nota: En general el llenado es suficientemente rápido como para despreciar el efecto de la reacción durante el mismo.

La Figura 2.2 muestra la secuencia de un lote, con dos operaciones de puesta a punto (agitar y aerar), todas sobre un único tanque, en un reactor aerobio.

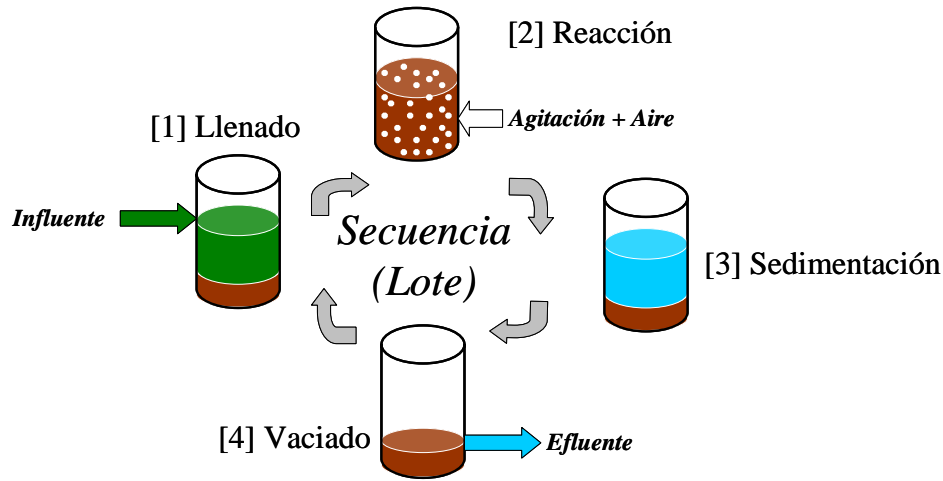


Figura 2.2. Secuencia básica para un lote en un reactor aerobio.

La introducción de aire es importante en un reactor con biomasa aerobia, para mantener el nivel de oxígeno necesario, de modo que los microorganismos puedan llevar a cabo su metabolismo sin limitación por este elemento.

El lote-alimentado (en inglés *fed-batch*) en la Figura 2.3 se diferencia del lote típico en que existe concurrencia entre las fases de llenado y reacción, independiente de si el flujo de llenado es un perfil predefinido (fuera de línea) o si se aplica alguna ley de control en línea (p.ej. en lazo cerrado). En general el perfil del flujo es una función del tiempo. En consecuencia, necesita un actuador (bomba de alimentación) capaz de suministrar un flujo variable.



Figura 2.3. Diagrama de fases y tiempos del lote-alimentado (*fed-batch*).

La propuesta *ED-TOC* de esta tesis es del tipo lote-alimentado pero utilizando un actuador *ON/OFF*, como en el lote tradicional. La idea es intercalar repetidas fases su-

cesivas de llenado parcial durante la reacción, a modo de una iteración de mini-lotes que omiten la decantación como se muestra en la Figura 2.4. La diferencia con el lote típico es que durante cada llenado parcial existe siempre reacción y no se desprecia su efecto. En ese sentido se parece a un lote-alimentado en el cual el perfil de llenado no es suave y regulado, sino compuesto por pulsos *ON/OFF* *i.e.* encendidos y apagados de la bomba de alimentación. La duración (*ON*) de cada pulso se controla de manera tal que este termina (*OFF*) cuando el efecto bola de nieve, explicado en la introducción, justo empieza a aparecer. Luego el siguiente mini-lote no comenzará sino hasta que dicho efecto ha desaparecido. La serie de pulsos así resultante, por tanto, mantendrá la velocidad de reacción oscilando cerca y alrededor de su máximo.

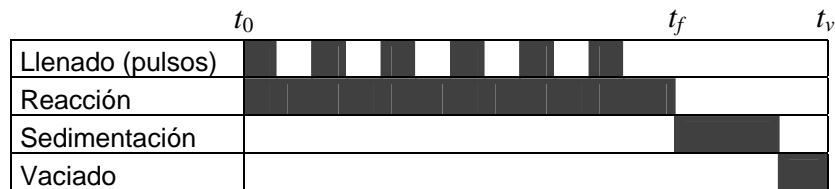


Figura 2.4. Diagrama de fases y tiempos *ED-TOC*.

2.1.3. Modelo matemático de las fases de llenado y reacción

Las fases de llenado y reacción son las únicas que tienen efecto en la reducción del t_v cuando se permite manipular exclusivamente el flujo de llenado. Las demás fases se consideran de tiempo fijo y por tanto no pueden contribuir a su minimización.

Condición 2.2. Para el modelo matemático del proceso, y para la estrategia de control óptimo, se consideran únicamente las fases de llenado y de reacción.

Supuesto 2.1. La homogenización del medio líquido es perfecta y el retardo en la transmisión de señales en él es marginal *i.e.* el sistema es de parámetros concentrados y se puede representar por ecuaciones diferenciales ordinarias.

Supuesto 2.2. Los posibles efectos aleatorios a nivel micro no afectan el comportamiento macro *i.e.* el sistema es determinístico.

Supuesto 2.3. La variación de los parámetros no es significativa en el corto plazo, *i.e.* el sistema es invariante en el tiempo, aunque pueden variar de una tanda a la siguiente. Algunos parámetros, sin embargo, podrían depender del estado del sistema.

Un modelo matemático con la ecuación de estado de la forma

$$\frac{d\mathbf{z}}{dt} = \mathbf{f}_z(\mathbf{z}) + u \cdot \mathbf{g}_z(\mathbf{z}) \quad (2.1)$$

y su ecuación de salida asociada, de la forma $\mathbf{y} = \mathbf{h}_z(\mathbf{z})$, pueden representar el comportamiento continuo del proceso durante las fases discontinuas consideradas (llenado y reacción) si se asumen como válidos los supuestos anteriores.

El siguiente modelo dinámico (Smets *et al.*, 2002) se ajusta al formato de espacio de estado de la ecuación (2.1):

$$\frac{dX}{dt} = [\mu - k_d]X - \frac{Q}{V}X \quad (2.2)$$

$$\frac{dS}{dt} = -k_1\mu X + \frac{Q}{V}[S_i - S] \quad (2.3)$$

$$\frac{dV}{dt} = Q \quad (2.4)$$

donde X , S , V , Q representan, respectivamente, las concentraciones de biomasa y sustrato, el volumen líquido en el tanque y el flujo volumétrico de alimentación del influente. Todas estas variables son función del tiempo y así se considera implícitamente p.ej. $X := X(t)$. El parámetro k_1 representa la constante de conversión de sustrato en biomasa. En las áreas biotecnológica y de bioprocesos se usa la equivalencia $k_1 = 1/Y$ donde Y (o también $Y_{X/S}$) representa un factor de conversión (en inglés **Yield coefficient**). Los parámetros μ , k_d , S_i representan, respectivamente, la tasa específica de crecimiento de la biomasa, la tasa de decaimiento de biomasa y la concentración de sustrato presente en el influente. Dichos parámetros son considerados constantes a excepción de μ , la cual es función de S . Para simplificar la nomenclatura se usará $\mu_t := \mu(S(t))$ cuando se haga

referencia a la señal generada por el valor de dicho parámetro en el tiempo. Otro caso especial es el de S_i el cual se considera constante durante cada tanda, pero que puede llegar a variar de manera importante entre tandas p.ej. durante un pico de carga. Dicho supuesto simplifica los análisis sin restar generalidad a los resultados y se justifica con la existencia de un tanque previo de igualación para el influente. En el caso PTAR, p.ej., esa variación representa una importante perturbación, no medible, del proceso.

En general el decaimiento de la biomasa es lento y su efecto resulta apreciable solamente luego de un plazo largo comparado con la duración de una reacción estándar *i.e.* k_d es pequeño. Además, durante gran parte de la fase de reacción, incluso si esta no se desarrolla de manera óptima, se verifica que el crecimiento de la biomasa es mucho mayor que su decaimiento *i.e.* $\mu(S) \gg k_d$. Por tanto, usando la Condición 2.2, la ecuación (2.2) se puede simplificar para propósitos del diseño de un controlador, como

$$\frac{dX}{dt} = \mu X - \frac{Q}{V} X. \quad (2.5)$$

El modelo presentado hasta ahora en las ecuaciones (2.3) a (2.5) representa procesos que no requieren oxígeno para su funcionamiento *i.e.* **anaerobios**. Para el caso de los procesos que si lo requieren, *i.e.* **aerobios**, se debe agregar la siguiente ecuación para explicar el balance del oxígeno disuelto (DO) en el seno del reactor (Dochain y Vanrolleghem, 2001)

$$\frac{dO}{dt} = -(k_2\mu + b)X + k_L a(O_{sat} - O) - (O - O_i)\frac{Q}{V}, \quad (2.6)$$

donde O es la concentración del DO y el parámetro k_2 representa la constante de conversión de oxígeno en biomasa. En las áreas biotecnológica y de bioprocesos se usa la equivalencia $k_2 = 1/Y_{X/O}$ donde la letra Y representa un coeficiente de producción (en inglés **Yield coefficient**). Los parámetros b , $k_L a$, O_{sat} y O_i representan, respectivamente, la tasa de respiración endógena, el coeficiente de transferencia de masa de oxígeno al medio líquido, el valor de saturación de la concentración del DO en ese medio y la concentración del DO en el influente. Dichos parámetros son considerados constantes a excepción de $k_L a$ el cual depende de V de una manera asociada a la forma geométrica del reactor particular.

Condición 2.3. El conjunto $\Omega_A = \{z \in \mathbb{R}^3 \mid 0 < X; 0 \leq S; V_0 \leq V \leq V_f\}$ restringe los valores de $z^T = [X, S, V]$, vector que representa el estado de un bioproceso anaerobio modelizado por las ecuaciones (2.3) a (2.5).

Condición 2.4. El conjunto $\Omega_B = \{z \in \mathbb{R}^4 \mid 0 < X; 0 \leq S; V_0 \leq V \leq V_f; O_{\min} \leq O \leq O_{sat}\}$, donde O_{\min} es el valor de DO por debajo del cual el efecto limitante no podría despreciarse, restringe los valores de $z^T = [X, S, V, O]$, vector que representa el estado de un bioproceso aerobio modelizado con las ecuaciones (2.3) a (2.6).

Condición 2.5. El conjunto $\Omega_Q = \{u \in \mathbb{R}^1 \mid 0 \leq Q \leq Q_{\max}\}$ restringe los valores de la señal de entrada $u = Q$, escalar que representa la entrada al bioproceso para la Condición 2.2 *i.e.* no se considera el flujo de vaciado.

Definición 2.2. Una señal de entrada se considera **completa** si cumple la Condición anterior y si

$$\int_{t_0}^{t_f} Q(t) dt = V_f - V_0.$$

Condición 2.6. Los parámetros asociados al modelo del bioproceso son estrictamente positivos a menos que, para alguno y explícitamente, se especifique lo contrario.

A continuación se introducen dos conceptos del modelo del proceso que permitirán, posteriormente, llevar a cabo el análisis de robustez del controlador diseñado:

- 1) En ausencia de incertidumbres las ecuaciones (2.3) a (2.6) constituyen el **modelo nominal** que se usará como referencia en este estudio. Dichas ecuaciones provienen de un balance de masas y son válidas cuando el reactor se encuentra en condiciones operacionales estándar y también cuando existen perturbaciones en el valor de los parámetros siempre que estas sean conocidas exactamente. Bajo los supuestos asumidos y dado que no contiene incertidumbres, dicho modelo es lo más cercano posible a la realidad.

- 2) El comportamiento del proceso real puede alterarse por múltiples factores no modelizados *i.e.* no incluidos en el modelo nominal p.ej. cambios en el pH o en la Temperatura, una inadecuada homogenización, fallas del proceso, etc. Cualquier efecto perturbador no modelizado se interpretará como una perturbación sobre los parámetros del modelo nominal del proceso. Igualmente los errores generados por los instrumentos en las mediciones (prácticas) se consideran perturbaciones inciertas sobre las variables del proceso nominales. Lo mismo aplica para las estimaciones de variables y para la identificación de parámetros. El modelo resultante de considerar todas las incertidumbres en los parámetros identificados y en las variables medidas, se conocerá como **modelo práctico**.

La diferencia entre el modelo práctico y el nominal es por tanto la presencia o no de incertidumbre en los parámetros y medidas respectivas. Además los parámetros del modelo nominal son ideales y no son accesibles en la práctica. Debe notarse que estas definiciones obligan a cualquier **controlador práctico** a utilizar el modelo práctico para su sintonía, pues son solamente los parámetros prácticos los que se conocen, no los nominales.

Por convención se **subrayará** el nombre del parámetro o de la variable cuando se desee representar su valor **práctico**, incierto, *i.e.* el valor nominal más la perturbación desconocida. El nombre sin subrayar representará el valor nominal.

El modelo nominal, al igual que el proceso real, permanece desconocido, escondido, para el controlador práctico pero no para un controlador nominal teórico. Lo que es común al modelo nominal y al práctico es su estructura, la cual es robusta por provenir de un balance de masas. Una excepción se puede presentar únicamente en casos extremos cuando un parámetro desaparezca al hacerse cero o infinito. Esto da ya un indicio para lograr robustez en el diseño de un controlador para dicho proceso, y es que en la medida en que las decisiones de control estén dirigidas por la estructura, no tanto por el valor de los parámetros o de la medición de sus variables, más inmune será el controlador a la incertidumbre en estos.

Las variables de salida del modelo son dependientes de la aplicación. Un caso de interés se presenta cuando dicha salida es función directamente proporcional a la tasa

específica de crecimiento de biomasa (μ). Ese es el caso cuando se genera un **producto gaseoso (PG)**, tal como se representa en la siguiente ecuación (Dochain y Vanrolleghem, 2001)

$$y_{PG} = k_{PG} \mu_t X \quad , \quad (2.7)$$

donde y_{PG} y k_{PG} representan el flujo del PG generado y su coeficiente de producción.

Para la clase de procesos estudiada se supone explícitamente que ni X ni S son medibles. Lo son V y las variables de salida particulares de cada caso, p.ej. la concentración de DO (O) para los SBR aerobios o y_{PG} para procesos que generen PG gaseosos medibles.

2.1.4. El parámetro $\mu(S)$

Las dificultades teóricas de control, para procesos en biorreactores, se desprenden de la forma de μ , que juega un papel clave en las principales ecuaciones del modelo del proceso. En su forma simplificada, μ es una función no lineal de la concentración del sustrato (S) que da una medida de la afinidad entre la biomasa y el sustrato particular. Para el caso de sustratos inhibitorios su forma no es monótona, lo cual causa problemas estructurales que reducen las propiedades de observabilidad del proceso (Vargas, 1999). Otra estructura diferente se presenta en el caso no inhibitorio, en el cual su forma si es monótona, y por tanto no ofrece realmente retos importantes al control del proceso. La Figura 2.5 representa dichas dos estructuras típicas.

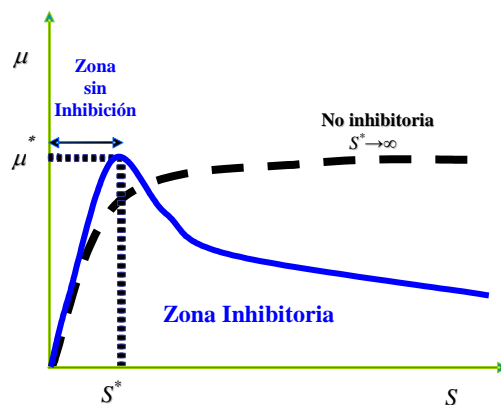


Figura 2.5. Tasa específica de crecimiento de biomasa. Inhibitoria (continua) y no inhibitoria (rayas).

Condición 2.7. La tasa específica de crecimiento de biomasa (μ) es una función continua de S , con $\mu(S) > 0$ para $S > 0$ y $\mu(0) = 0$, tal que tiene un único máximo (μ^*), global, para un valor de sustrato $S^* > 0$ i.e. $\mu(S^*) = \mu^*$. Además la función μ crece monótonicamente en el rango $S \in [0, S^*)$ y luego decrece, otra vez monótonicamente, en el rango $S \in (S^*, \infty)$.

En la literatura se presentan varios tipos de modelos inhibitorios aproximados para μ , p.ej. el tipo Haldane o Andrews (Andrews, 1968) representado por

$$\mu(S) = \frac{\mu_o S}{K_S + S + S^2 / K_I} \quad (2.8)$$

donde K_S , K_I , μ_o representan las constantes de: saturación o afinidad; inhibición; y una constante relacionada al máximo μ^* (Figura 2.6) que, para este caso particular, es definido por las ecuaciones

$$S^* = \sqrt{K_S K_I} \quad ; \quad \mu^* = \frac{\mu_o}{1 + 2S^* / K_I} \quad .$$

También se encuentran modelos no inhibitorios, p.ej. el tipo Monod

$$\mu(S) = \frac{\mu_o S}{K_S + S} \quad (2.9)$$

En general dichos modelos cumplen la Condición 2.7, por lo cual es razonable decir que esta es una condición natural del problema y no impone restricciones a la clase de procesos a estudiar. Es importante recordar, de estos modelos, su alta variabilidad p.ej. se han reportado variaciones del $\pm 50\%$ en los parámetros de modelos tipo Haldane (Ellis *et al.*, 1996). Precisamente por ser solamente aproximaciones, y por su alta variabilidad, se ha decidido en esta tesis no limitarse a un modelo inhibitorio particular sino, al costo quizás de complicar un poco las explicaciones, rescatar lo que es importante en su estructura primaria o fundamental.

En el caso de sustratos tóxicos existe una zona extrema en la cual la biomasa se estresa y pierde viabilidad. Un modelo que prediga esta situación no pudo ser encon-

trado en la literatura. Implica un cambio, radical y rápido, de los parámetros de μ , es más, en un caso extremo el cambio podría ser irreversible en el tiempo. Por tal razón dicha situación se considera más bien como una falla del proceso, la cual debe evitarse conservando al proceso dentro de sus rangos operativos de diseño. La Figura 2.6 muestra, en línea punteada, un modelo inhibitorio tipo Haldane y, en línea continua, una posible representación de una situación de estrés suave (reversible). Esa zona de operación no será considerada durante este estudio, pero si se considerarán las condiciones que garantizan que el controlador no lleve al proceso a dicha zona, ni más allá, durante un pico de carga.

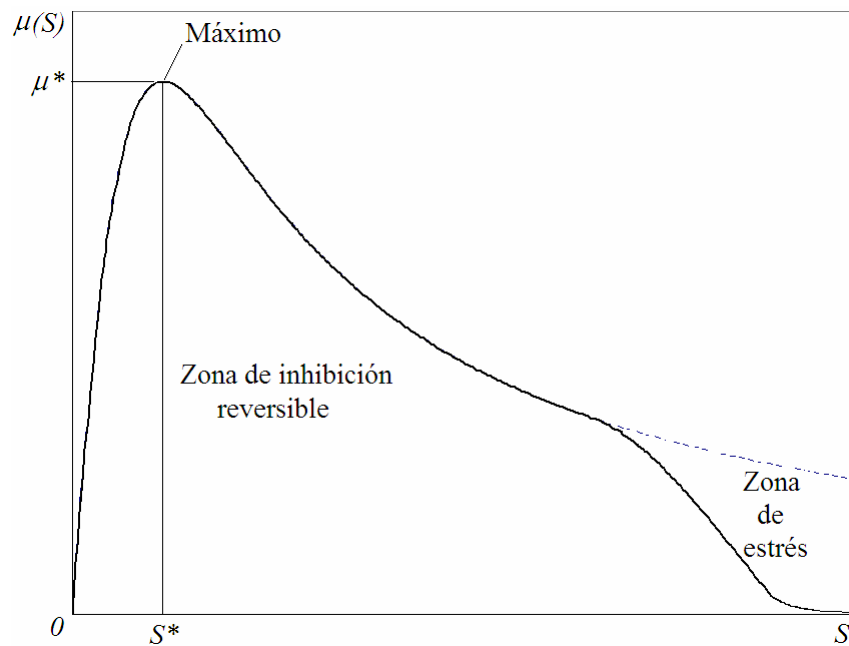


Figura 2.6. Modelo inhibitorio de crecimiento de biomasa tipo Haldane
Punteado=normal; Continuo=con falla por estrés.

Nótese que el modelo inhibitorio tipo Haldane de la ecuación (2.8) se convierte en el modelo no inhibitorio tipo Monod de la ecuación (2.9) en el límite cuando $K_I \rightarrow \infty$. Este es un claro ejemplo de un cambio de estructura del proceso motivado por la desaparición de un parámetro *i.e.* K_I desaparece del modelo, al hacerse infinito, para indicar que el sustrato no tiene efecto inhibitorio sobre la biomasa.

2.1.5. Clase de procesos considerados

Este estudio considerará los procesos cuyo comportamiento pueda ser incluido en una de las clases definidas a continuación:

Clase A. La conforman los **SBR anaerobios** cuyas fases de llenado y reacción se describen con el modelo conformado por las ecuaciones (2.3) a (2.5) y tienen por vector de salidas medibles (\mathbf{y}) el flujo de un PG, p.ej. ecuación (2.7), y el volumen *i.e.* $\mathbf{y}^T = [y_{PG}, V]$. Satisfacen la Condición 2.5 (pág. 38), la Condición 2.6, la Condición 2.7 y $\Omega = \Omega_A$ de la Condición 2.3.

Clase B. La conforman los **SBR aerobios** cuyas fases de llenado y reacción se describen con el modelo conformado por las ecuaciones (2.3) a (2.6), y tienen por vector de salidas medibles (\mathbf{y}) la concentración de oxígeno disuelto y el volumen *i.e.* $\mathbf{y}^T = [O, V]$. Satisfacen la Condición 2.5 (pág. 38), la Condición 2.6, la Condición 2.7 y $\Omega = \Omega_B$ de la Condición 2.4.

Adicional a la clasificación anterior también es posible tipificar dichos procesos por otras muy diversas características. De especial interés resultará, para su control, la división entre los procesos **productores de biomasa** y los **degradadores de sustrato**. Estos últimos se caracterizan porque el metabolismo microbiano se ha ajustado de forma que la producción de biomasa es mínima. Por tanto el crecimiento de biomasa en un proceso degradador de sustrato durante una reacción estándar es prácticamente despreciable *i.e.* la biomasa total ($B = XV$) al final de la reacción ($B_f = X_f V_f$) es apenas marginalmente mayor que la que se tenía al inicio ($B_0 = X_0 V_0$), y es la misma que se usará para el inicio de la siguiente tanda. Esto quiere decir que los procesos degradadores de sustrato no tienen por objetivo la generación de biomasa. Esta se va acumulando lentamente en el seno del reactor con cada tanda. En la práctica existirán, por supuesto, eventuales operaciones de puesta a punto (purga) cada cierto número de tandas, para re-ajustar su valor nominal y fijar un cierto tiempo de retención de sólidos en el reactor.

Debe aclararse que se considerarán procesos cuyo modelo pueda simplificarse a la Clase A o a la Clase B, independiente de que existan más de un tipo de biomasa o sustrato en la reacción y de que se formen más de un tipo de productos. Si la esencia básica de su comportamiento, en términos del modelo matemático, se puede aproximar a la de un único sustrato equivalente con una sola biomasa equivalente que cumplan las condiciones de la clase, entonces se incluye en el estudio.

2.1.6. Meta del Proceso y Fin de la Reacción

Es necesario definir un criterio común (para procesos Clase A o Clase B; sean degradadores de sustrato o productores de biomasa) que defina el instante t_{mp} cuándo la meta del proceso ha sido alcanzada. Esto permitiría tomar una mejor decisión de cuándo se podría dar por terminada la fase de reacción (t_f). Según la estrategia de control es posible que estos dos momentos no coincidan. p.ej. en la *FTC* normalmente se asigna un tiempo de reacción nominal mayor al tiempo práctico esperado de meta del proceso ($t_f > t_{mp}$) pero, aún así, una perturbación podría impedir el cumplimiento de la meta en el tiempo asignado *i.e.* $t_f < t_{mp}$. Por el contrario, en una estrategia de tiempo óptimo, es indispensable garantizar tanto que la meta del proceso se cumpla a cabalidad como que no se desperdicie ningún tiempo adicional *i.e.* se requiere que $t_f = t_{mp}$.

Se propone como criterio de meta la siguiente condición:

Criterio 2.1. Se considera que la meta del proceso se ha cumplido cuando el estado del proceso (\mathbf{z}) alcanza por vez primera el conjunto de meta definido por $\Omega_{mp} = \{\mathbf{w} \in \Omega \mid S < S_f; V \geq V_f\}$ representable, equivalentemente, como $\Omega_{mp} = \{\mathbf{w} \in \Omega \mid (\mu_t < p_f \mu^*) \wedge (S < S^*); V \geq V_f\}$ tal como se muestra en la Figura 2.7, donde p_f es un parámetro de sintonía que relaciona el valor de la concentración del sustrato al momento de lograrse la meta del proceso, *i.e.* $S_f := S(t_{mp})$, con el valor de μ_t en función de su máximo.

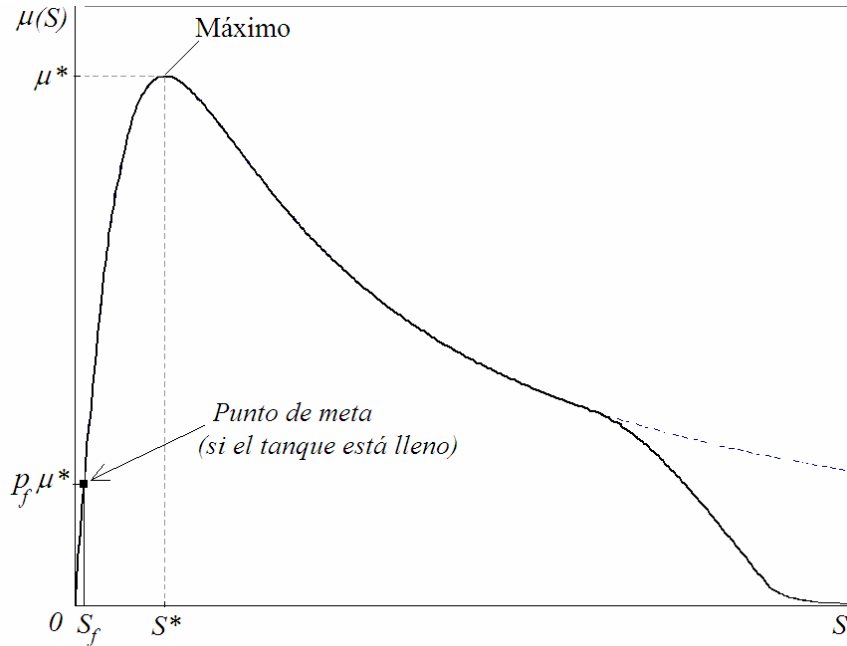


Figura 2.7. Punto de meta del proceso en función de S y de μ .

Para el caso PTAR esta condición quiere decir que la concentración tóxica dentro del tanque ha disminuido a un valor aceptable p.ej. se puede seleccionar S_f igual al límite máximo de emisión, del efluente ya tratado, impuesto por la ley. Para el caso de la producción de biomasa dicho criterio significa que con la cantidad de sustrato remanente en el tanque solamente se generaría una cantidad adicional marginal de biomasa, tal que ya no se justifica el tiempo extra de espera.

2.1.7. Propiedades sistémicas del modelo nominal del proceso

A continuación se analizarán dos propiedades del proceso que serán de utilidad para el diseño y el análisis de un controlador óptimo y robusto.

Estabilidad nominal autónoma

Una simple inspección de la Clase B revela que el sistema autónomo (para $Q = 0$) tiene un punto de equilibrio que es función unívoca de sus condiciones iniciales: V es indiferentemente estable al permanecer en su valor ante la ausencia de flujo; S tiende a cero asintóticamente ya que es transformado por la biomasa hasta terminarse; X tiende asintóticamente a un valor $X_{eq} \geq X_0$, definido por

$$X_{eq} = X_0 + \frac{S_0}{k_1} ,$$

y que depende de su valor inicial X_0 , del sustrato inicial S_0 y de la relación estequiométrica que explica la transformación del sustrato presente en el reactor en biomasa (k_1), dado que la biomasa también crece del sustrato hasta que este se termina; y O tiende a O_{eq} definido por

$$O_{eq} = O_{sat} - \frac{b}{k_L a} X_{eq} , \quad (2.10)$$

y que depende de la fracción del consumo por respiración endógena contra la transferencia de oxígeno al medio líquido por el sistema aerador.

Para la Clase A aplican los mismos resultados anteriores a excepción, claro, de los de la concentración del DO .

Esta propiedad es importante pues muestra que, independiente de la ley de control usada para llenar al bioreactor, una vez la entrada esté completa el sistema tendrá un comportamiento autónomo y por tanto su estabilidad se garantiza. Es más, su estado de equilibrio final será el mismo independiente de la ley de control usada. Lo que varía es la forma en el tiempo y la energía requerida para llegar a dicho estado.

Controlabilidad y alcanzabilidad

Los sistemas descritos en la Clase A no son totalmente controlables. No es posible alcanzar cualquier punto del espacio de estado permitido (Ω), en tiempo finito, mediante alguna entrada (Q) completa p.ej. debido a que no se puede hacer disminuir el volumen. También, por la dilución ($D := Q/V$), sería imposible llevar la concentración de sustrato mas allá de $\max(S_0; S_i)$. El mismo resultado, con aún mayores restricciones para el DO , se aplica a la Clase B. Sin embargo existe un margen de maniobra parcial para el control.

Definición 2.3. Un punto \mathbf{w} de Ω es alcanzable si, respetando las condiciones de la clase y a partir de las condiciones iniciales dadas (\mathbf{z}_0), existe alguna forma de manipular (controlar) una entrada (Q) completa de modo que se pueda alcanzar dicho estado (\mathbf{w}) del proceso en tiempo finito.

El subconjunto de alcanzabilidad está compuesto por todos los puntos alcanzables a partir de la condición inicial e indica el margen de control que se tiene sobre el sistema. Su determinación exacta es complicada (e innecesaria) pero, p.ej. por la estructura de la Clase A, se puede garantizar que es un subconjunto de: $0 \leq S \leq C_\infty/V_0$; $V_0 \leq V \leq V_f$; $B_0/V_f < X \leq B_\infty/V_0$ donde

$$C_\infty = S_0 V_0 + \int_0^\infty S_i Q(t) dt \quad ,$$

es el total de sustrato procesado, $B_0 = X_0 V_0$ es la biomasa total inicial y

$$B_\infty = B_0 + \frac{C_\infty}{k_1} \quad ,$$

es el máximo valor alcanzable de biomasa. El análisis es similar para la Clase B.

2.2. Optimalidad

La motivación para buscar la optimalidad en tiempo de proceso para el caso de las PTAR consiste en aumentar la capacidad de carga diaria aplicable. Visto de otra forma, si dicha carga diaria ya está predefinida, entonces con un diseño óptimo del control se pueden lograr reactores más pequeños, más económicos y con menor costo operacional por sus ahorros energéticos al requerir menos tiempo de agitación y menos tiempo de aeración. Todos esos ahorros son de interés pues el costo del reactor y de su operación representa un gasto indeseable que no aporta a la cadena de generación de valor de las empresas contaminadoras. Debe aclararse que la reducción del tiempo de tratamiento de cada tanda al mínimo no debe entrar en conflicto con la norma ambiental ni favorecer la generación de biomasa adicional.

En el caso biotecnológico la motivación de aumentar la productividad diaria también existe. Dado que los equipos son costosos y que el valor agregado del producido es alto, es natural buscar la optimización de dichos equipos para obtener la mayor cantidad posible de producido en menor tiempo. Incluso un pequeño porcentaje de mejoría, siempre que sea consistente y repetible, se constituiría en una posible fuente de ingreso adicional considerable.

2.2.1. Optimalidad nominal (exacta)

El problema de optimalidad, en el sentido del tiempo mínimo de procesamiento, consiste en calcular una entrada óptima completa (Q_{opt}) capaz de llevar al sistema, en el menor tiempo posible, desde su condición inicial (\mathbf{z}_0) hasta cumplir su meta de proceso. Sea el índice de costo $t_{mp} = T(Q, \mathbf{z}_0)$ una función del estado inicial y de la entrada, que calcula el tiempo necesario en alcanzar la meta. Por tanto $t_{mp,opt} = T(Q_{opt}, \mathbf{z}_0)$ es el tiempo mínimo de meta para una condición inicial dada, *i.e.* un controlador nominal que garantice que $t_f = t_{mp,opt}$ es un controlador óptimo de tiempo mínimo o, en este contexto, controlador de tiempo óptimo. En adelante se le conocerá simplemente como **controlador óptimo**.

Como se mencionó en la Introducción, el problema de tiempo óptimo para la clase de problemas considerados ya ha sido ampliamente estudiado. A continuación se aprovechan esos resultados directamente.

El perfil nominal de alimentación de tiempo mínimo es generado exactamente por el *TOC* nominal, y es único. Cuando se consideran las limitaciones del actuador de flujo (Condición 2.5, pág. 38), dicho perfil exacto se compone de tres arcos. Dos son del tipo *bang-bang*, acción que consiste en conmutar el actuador a uno de dos estados extremos posibles p.ej. *ON/OFF* *i.e.* flujo máximo (*ON*) o flujo nulo (*OFF*). El otro arco es singular, tal que el flujo se calcula con base en el estado del proceso pudiendo tomar valores intermedios. Todos los arcos deben satisfacerse exactamente para lograr la minimización de tiempo. Para la optimalidad de los procesos discontinuos no bastan convergencias asintóticas, pues no se trata de buscar un punto de operación óptimo, lo cual sería quizás aceptable para el caso de procesos en continuo, sino de seguir la tra-

yectoria óptima nominal de manera exacta (Moreno, 1999) *i.e.* la compuesta por los tres arcos.

La Figura 2.8 muestra la trayectoria *TOC* nominal, proyectada en el plano *SV* (**trayectoria-SV**), para dos familias de condiciones iniciales. Aplica tanto para la Clase A como para la Clase B, puesto que la dinámica de las demás variables no afecta dicha proyección, siempre que se cumplan las restricciones no limitantes ya establecidas. Dicha trayectoria se logra en el modo de llenado tipo lote-alimentado (Figura 2.3) usando una ley *TOC* que manipula el flujo de entrada óptimamente *i.e.* $Q = Q_{opt}$.

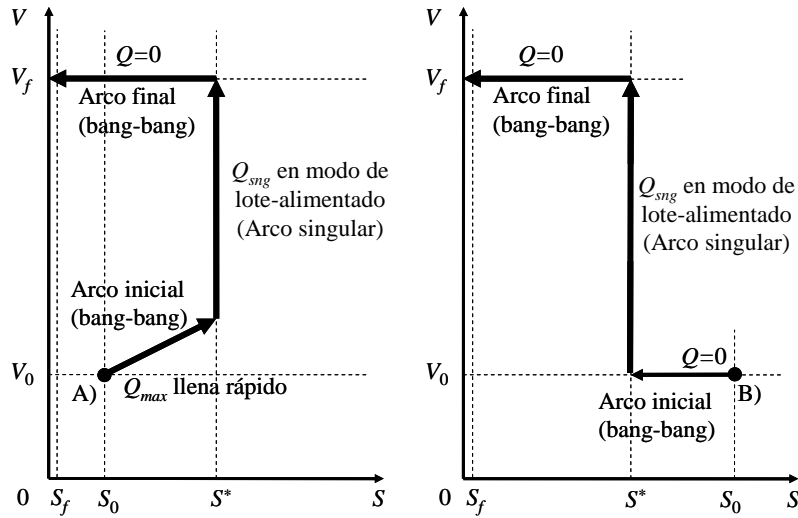


Figura 2.8. Trayectoria-SV *TOC* según la condición inicial: A) $S_0 < S^*$; B) $S_0 \geq S^*$.

El Q_{opt} para el arco inicial depende de la condición de arranque: Q_{max} si $S_0 < S^*$ (Figura 2.8A), o cero si $S_0 \geq S^*$ (Figura 2.8B). El Q_{opt} necesario para generar el arco singular exactamente (Q_{sng}) fue explicado por Moreno (1999) y se expresa como

$$Q_{sng} = \frac{k_1 \mu X V}{S_i - S} \quad , \quad (2.11)$$

que mantiene al estado del proceso en la **superficie singular** ($S = S^*$). Para el arco final el tanque ya estará lleno, *i.e.* Q completada, así que forzosamente se aplica $Q_{opt} = 0$.

2.2.2. Mejorabilidad

En el contexto de los procesos de las clases consideradas en este trabajo es necesario particularizar un concepto de mejorabilidad, que permita determinar cuando es posible minimizar el tiempo de reacción de un lote al aplicar una ley de control tipo lote-alimentado adecuada.

En principio, la inhibición del proceso tipo lote, causada por el efecto bola de nieve, es la responsable de un funcionamiento subóptimo. Por tanto si el influente a su máximo flujo no es capaz de generar el efecto bola de nieve, entonces el proceso no podrá mejorarse. Lo anterior se resume en la

Condición 2.8. Un lote es **mejorable** si, cuando el flujo de llenado es máximo, la concentración de sustrato siempre se incrementa y, si además, al menos un punto de la superficie singular para el cual $V = V_f$ es alcanzable (Definición 2.3, pág. 47). Nota: La primera parte de esta condición equivale a que $dS / dt > 0$ cuando $Q = Q_{max}$ en la ecuación (2.3).

Conceptualmente la **mejorabilidad** quiere decir que la combinación del flujo máximo permisible (Q_{max}) y la concentración de sustrato disponible en el influente (S_i) es capaz de empujar la trayectoria del proceso, cuando menos lo suficiente, para permitirle cruzar la superficie singular luego de terminar el llenado. En caso contrario no es posible diseñar un control sobre Q que haga un mejor trabajo de lo que haría un lote típico. Cuando este sea el caso se dirá que el sistema no es **mejorable**, entendiéndose por esto que ya de por sí la trayectoria de lote VTC es la óptima para ese caso.

Nota: Se usa la VTC y no la FTC pues la primera permite detectar el tiempo de meta.

A modo de comparación con el caso de la sub-sección anterior, la Figura 2.9 presenta las trayectorias-SV que se obtendrían si en vez de usar el TOC (Figura 2.8) se usase el modo de lote VTC . Se obtendrían únicamente los dos arcos *bang-bang* asociados, respectivamente, a las fases de llenado y reacción en la Figura 2.1.

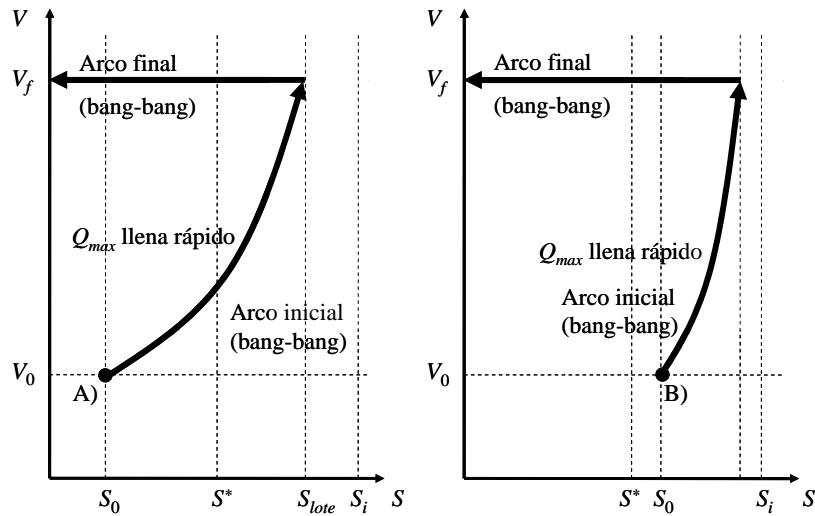


Figura 2.9. Trayectoria-SV VTC ($S_i > S^*$) según la condición inicial.

A) $S_0 < S^*$ i.e. lado izquierdo de la superficie singular

B) $S_0 \geq S^*$ i.e. lado derecho de la superficie singular.

Analizando la ecuación (2.11) a la luz de la Condición 2.5 (pág. 38) es claro que el arco singular no siempre es alcanzable. Un caso sería cuando $S_0 < S_i < S^*$ pues al evaluar la ecuación (2.11) resulta $Q_{sng} < 0$. Aún si se usa el VTC con su llenado rápido, no sería posible lograr la trayectoria de la Figura 2.9A, sino la de la Figura 2.10A. Lo anterior debido a que el influente no puede forzar una concentración en el tanque superior a la propia. Por tanto la trayectoria del proceso nunca tocaría la superficie singular.

Un poco más complicado parece ser el asunto si $S_i < S^* < S_0$ en la Figura 2.10B, pero si el proceso no es mejorable entonces la superficie singular será cruzada antes de terminar de llenar el tanque y, una vez suceda esto, no hay forma de regresar a ella.

Nótese que aunque en un proceso biotecnológico podría tener sentido que $S_0 > S^*$, no tiene sentido práctico que $S_i < S_0$. En una aplicación PTAR tampoco pues, en general, para dicho caso, $S_0 \rightarrow 0$.

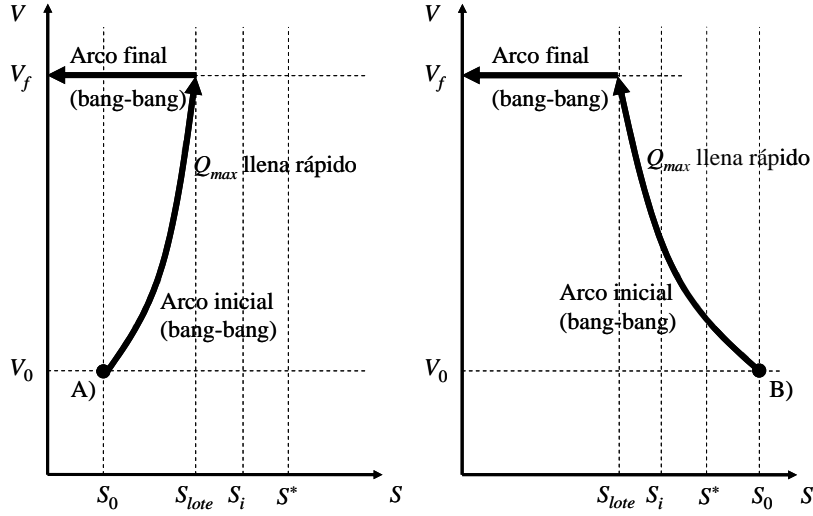


Figura 2.10. Trayectoria-SV VTC ($S_i < S^*$) según la condición inicial.

A) $S_0 < S^*$; B) $S_0 \geq S^*$.

2.2.3. Optimalidad práctica

La implementación de la estrategia *TOC* nominal confronta limitaciones prácticas fundamentales que la hacen sub-óptima, p.ej. es difícil calcular Q_{sng} en la ecuación (2.11) sin incertidumbres lo cual impide su realización exacta. Dicha implementación se dificulta aún más al considerar que ni X ni S son medibles. Por tal razón la optimalidad nominal se usará únicamente para evaluar, por contraste, qué tan cerca de ella está una trayectoria práctica dada. Para ello se usará algún índice de optimalidad normalizado, relacionado con el índice de costo (t_{mp}), el cual indica qué tan “cercana” es una trayectoria particular a la trayectoria óptima nominal.

Cuando un controlador práctico trata de realizar la trayectoria óptima nominal el resultado es una aproximación, p.ej. la de la Figura 2.11. Se considerará que dicha aproximación sub-óptima es prácticamente-óptima (**practi-óptima**) si su índice de optimalidad está por encima de una cota definida arbitrariamente por el diseñador. Luego se verá cómo relacionar dicha cota con la zona practi-óptima de la Figura 2.11 definida entre S_{min} y S_{max} . En este estudio, por facilidad, se elige relacionarlos entre si mediante características estructurales de la tasa específica de crecimiento de biomasa *i.e.* se escogen $S_{min} \leq S_{max}$ como las soluciones a $\mu(S) = p_{sng} \mu^*$, para $p_{sng} \in (0,1)$ tal como lo representa la Figura 2.12.

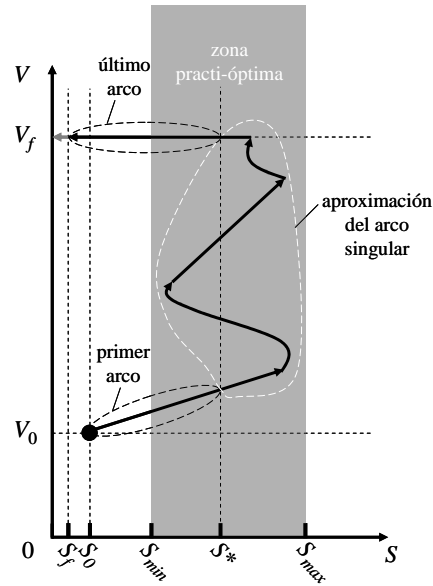


Figura 2.11. Trayectoria-SV practi-óptima (aproxima la trayectoria nominal de la Figura 2.8A)

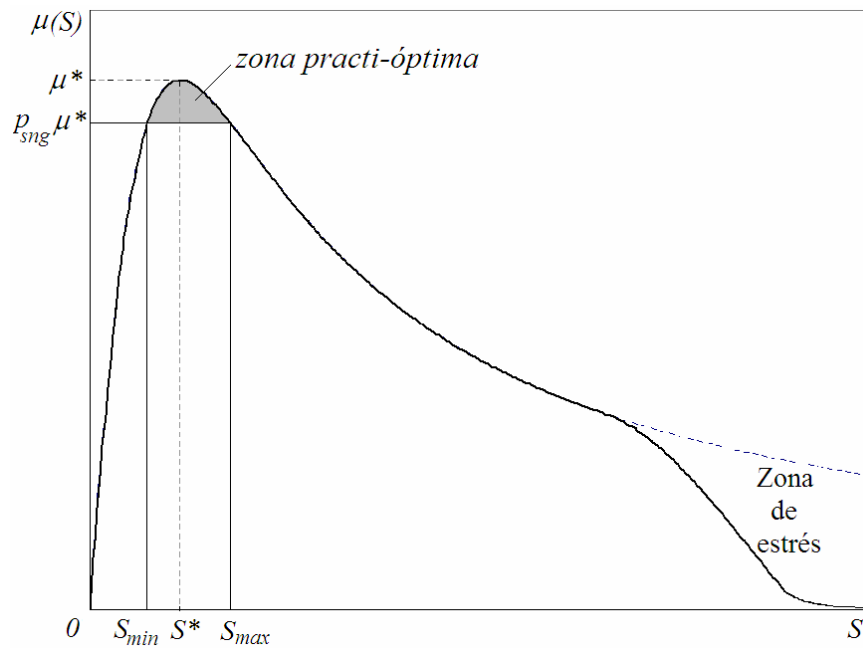


Figura 2.12. Zona practi-óptima. Relación entre p_{sng} y S_{min} , S_{max} .

El **tubo singular** (Ω_{sng}), definido por $\Omega_{sng} = \{w \in \Omega \mid S \in \mathbb{R}^+, \mu(S) \geq p_{sng} \mu^*\}$, es una vecindad de la porción singular de la trayectoria óptima del proceso, y su proyección en el plano-SV genera la zona practi-óptima de la Figura 2.11.

Sea $\Delta(Q, p_{sng}, \mathbf{z}_0)$ el exceso de tiempo, adicional al mínimo, necesitado por una trayectoria practi-óptima para lograr la meta de proceso. Usando los resultados de Moreno (1999) es posible afirmar que Δ es continua, finita, y que $\Delta \rightarrow 0$ cuando $p_{sng} \rightarrow 1$ *i.e.* la meta será alcanzada en tiempo finito (t_{mp}) y este puede hacerse tan cercano como se desee al óptimo ($t_{mp.opt}$). Por tanto un posible índice de optimalidad temporal, normalizado, consiste en la fracción entre los índices de costo de la trayectoria óptima nominal y de la trayectoria evaluada

$$I_t := \frac{t_{mp.opt}}{t_{mp}} = \frac{t_{mp.opt}}{t_{mp.opt} + \Delta(Q, p_{sng}, \mathbf{z}_0)}, \quad (2.12)$$

el cual daría una medida de la relación del tiempo que tarda en alcanzar la meta la trayectoria subóptima bajo análisis comparado con el de la óptima nominal ideal.

Definición 2.4. Una **aproximación del arco singular** nominal es aquella parte de una trayectoria práctica (Figura 2.11) delimitada de la siguiente manera:

- Inicia en $t = t_{0.sng}$ cuando la trayectoria se halle ya en Ω_{sng} y suceda, por vez primera, uno de estos dos eventos: que la trayectoria cruce la superficie singular ($S = S^*$), o que $Q \neq Q_{0.opt}$, donde $Q_{0.opt}$ es el valor nominal del flujo óptimo del arco *bang-bang* inicial.
- Finaliza en $t = t_{f.sng}$ cuando suceda, por vez primera, alguno de estos dos eventos: que Q se complete (*i.e.* que $V = V_f$), o que la trayectoria, estando previamente en Ω_{sng} , salga para no regresar.
- Por tanto la duración del primer arco *bang-bang* es $T_{0.bb} = t_{0.sng} - t_0$, la de la aproximación al arco singular es $T_{sng} = t_{f.sng} - t_{0.sng}$ y la del último arco *bang-bang* es $T_{f.bb} = t_{mp} - t_{f.sng}$.

Ahora bien, para una trayectoria practi-óptima es posible usar a p_{sng} directamente como cota inferior de otro posible índice de optimalidad (I_μ), normalizado también, el cual se puede definir como

$$I_{\mu} := \frac{\min_{arco.sng} \{\mu_t\}}{\mu^*} \geq p_{sng} \quad , \quad (2.13)$$

que da una medida de que tan cerca permanece μ_t del valor que debería tener, nominalmente, durante toda la aproximación del arco singular. Dicha ecuación relaciona el mínimo valor ($\min_{arco.sng} \{\mu_t\}$) que haya tomado μ , durante algún instante del tiempo que tomó realizar dicha aproximación, con su máximo posible valor (μ^*).

Se propone usar a p_{sng} para la siguiente definición del criterio de optimalidad práctica (practi-optimalidad), que se utilizará durante los análisis de robustez del *ED-TOC*:

Definición 2.5. Una trayectoria generada por una entrada completa es **practi-óptima** si realiza, en sus porciones externas a Ω_{sng} , los arcos inicial y final de la trayectoria óptima nominal de manera exacta y si su porción aproximativa al arco singular permanece en Ω_{sng} i.e. $I_{\mu} \geq p_{sng}$.

Relación entre los índices de optimalidad I_t e I_{μ}

Definición 2.6. Un proceso en lote es **altamente mejorable** cuando pasa la mayor parte del tiempo de reacción inhibido. Esto implica que su índice de optimalidad (I_t) al ser controlado en el modo *VTC* es bajo y, además, que el tiempo que le toma realizar los arcos *bang-bang* inicial y final es muy pequeño comparado con el tiempo total de la reacción.

Reescribiendo la ecuación (2.12), para comparar la trayectoria del lote *VTC* con el lote-alimentado óptimo, en función de los tiempos que tarda cada arco (Definición 2.4, pág. 54) de cada una de dichas trayectorias se obtiene que

$$I_t := \frac{t_{mp.opt}}{t_{mp}} = \frac{T_{sng.opt} + (T_{0.bb.opt} + T_{f.bb.opt})}{T_{sng} + (T_{0.bb} + T_{f.bb})} .$$

Aplicando la definición anterior puede aproximarse dicho índice de optimalidad, para procesos altamente mejorables, como

$$I_t \approx \frac{T_{sng.opt}}{T_{sng}} \quad (2.14)$$

Si adicionalmente el proceso es degradador de sustrato, *i.e.* del tipo que interesa primordialmente en este estudio, los índices descritos en las ecuaciones (2.13) y (2.14) tienen equivalencia de varias maneras:

- Están normalizados *i.e.* $I_\mu, I_t = 1$ para la trayectoria nominal óptima y $0 < I_\mu, I_t < 1$ para cualquiera otra.
- $I_\mu, I_t \rightarrow 1$ cuando $p_{sng} \rightarrow 1$.
- Ambos están acotados por debajo en función de p_{sng} *i.e.*

$$I_\mu \geq p_{sng} \quad ; \quad I_t \geq p_{sng} \frac{S_i - S^*}{S_i - S_{\min}} \approx p_{sng}.$$

El acotamiento para I_t descrito en la desigualdad anterior puede probarse de la siguiente manera (esbozo): El tiempo T_{sng} que tarda la aproximación al arco singular en la ecuación (2.14) es inversamente proporcional al valor del flujo necesario para generarla. Se mostrará que el flujo utilizado por la aproximación más lenta (menos óptima) que viva en el tubo singular se relaciona aproximadamente en p_{sng} veces el flujo singular, y por tanto el tiempo de cualquier otra aproximación del arco singular, que viva también en el tubo singular, será inferior a $1/p_{sng}$ veces el tiempo óptimo $T_{sng.opt}$.

La aproximación más lenta al arco singular es una que vive en alguna de las fronteras del tubo singular, dado que allí se encuentra el menor valor de μ *i.e.* $p_{sng} \mu^*$. Esta se caracteriza por sostener un valor constante de S durante dicha aproximación. El flujo necesario para mantener una concentración de sustrato constante en el tanque (S_{kte}) se encuentra igualando a cero la ecuación (2.3), obteniendo

$$Q|_{S=S_{kte}} = \frac{k_1 \mu(S_{kte}) B}{S_i - S_{kte}},$$

donde $B = XV$ es la biomasa total.

Para iguales condiciones iniciales de volumen y biomasa, e igual volumen final, los flujos que ejecutan exactamente el arco singular, y que lo aproximan siguiendo la frontera izquierda y derecha del tubo singular, respectivamente, son

$$Q|_{S=S^*} = \frac{k_1 \mu^* B}{S_i - S^*}; \quad Q|_{S=S_{\min}} = \frac{k_1 p_{sng} \mu^* B}{S_i - S_{\min}}; \quad Q|_{S=S_{\max}} = \frac{k_1 p_{sng} \mu^* B}{S_i - S_{\max}};$$

donde de los dos últimos el menor (menos óptimo) es el izquierdo, dado que $S_{\min} < S_{\max}$.

Por tanto, dado que $S^* \approx S_{\min}$ y $S_i \gg S^*$, se obtiene

$$\frac{Q|_{S=S_{\min}}}{Q|_{S=S^*}} = p_{sng} \frac{S_i - S^*}{S_i - S_{\min}} \approx p_{sng} \quad \blacksquare$$

2.3. Robustez

La búsqueda de la robustez es también muy importante, como la de la optimalidad, en especial ante la dificultad de identificación y variabilidad de los parámetros biológicos. En el caso ambiental de las PTAR un problema grave, adicional a dicha variabilidad, proviene de perturbaciones externas al reactor, que se presentan como una gran incertidumbre paramétrica en el valor de la concentración tóxica del sustrato a ser tratado. Debido a fluctuaciones del comportamiento del efluente generado por la industria contaminante, la concentración tóxica presente en este puede alcanzar valores inaceptables para los diseños convencionales de reactores, con la consecuente pérdida de viabilidad reflejada en la imposibilidad de utilizar el reactor durante el periodo de tiempo que tarda re-inocularlo y aclimatarlo de nuevo a sus condiciones operacionales. Un control capaz de hacer frente robustamente a estos picos de carga (inesperados y no medibles), deteniendo el dañino efecto bola de nieve asociado, representaría una novedad muy útil en la práctica.

Pero, antes de diseñar dicho controlador robusto en el próximo capítulo, es necesario disponer de una forma de evaluarlo. Se relacionará la robustez con la cualidad de un controlador práctico dado de responder de manera similar a como lo haría el nominal, a pesar de las incertidumbres en los parámetros y/o en las mediciones disponibles.

Definición 2.7. La incertidumbre en un valor nominal $\lambda > 0$ es **acotada** si se puede garantizar, con una confianza suficientemente alta como para considerarlo prácticamente cierto, que $\lambda \in (\lambda^-, \lambda^+)$, donde la cota inferior $\lambda^- \in (0, \underline{\lambda}]$ y la cota superior $\lambda^+ \in [\underline{\lambda}, \infty)$. Así se garantiza que el parámetro no desaparece singularmente del modelo práctico, ni haciéndose cero ni infinito respectivamente, debido a alguna perturbación incierta.

Supuesto 2.4. El factor de incertidumbre en λ es caracterizable a partir de su valor incierto ($\underline{\lambda}$), de manera proporcional al mismo, de la siguiente manera: $\lambda^- = \underline{\lambda}^*(1 - \chi^-(\underline{\lambda}))$ y $\lambda^+ = \underline{\lambda}^*(1 + \chi^+(\underline{\lambda}))$.

Definición 2.8. Sea $\chi(\underline{\lambda}) = \max(\chi^-(\underline{\lambda}), \chi^+(\underline{\lambda})) \in [0, \infty)$ el factor máximo de incertidumbre de $\underline{\lambda}$ en λ . Aceptando el Supuesto 2.4 se tiene que $\chi^-(\underline{\lambda}) = 1 - \lambda^-/\underline{\lambda} \in [0, 1]$ y $\chi^+(\underline{\lambda}) = \lambda^+/\underline{\lambda} - 1 \in [0, \infty)$. Esto resultará de utilidad práctica cuando $\chi(\underline{\lambda}) \leq 1$, especialmente si la incertidumbre es simétrica *i.e.* $\chi^-(\underline{\lambda}) = \chi^+(\underline{\lambda})$.

Definición 2.9. La incertidumbre en λ es **total** si $\chi^-(\underline{\lambda}) \rightarrow 1$ y $\chi^+(\underline{\lambda}) \rightarrow \infty$.

Supuesto 2.5. La medición (\underline{V}) del volumen (V) es confiable y cierta *i.e.* no es fuente significativa de incertidumbres ni por ruido ni por perturbación *i.e.* su factor de incertidumbre es prácticamente nulo: $\chi(\underline{V}) \approx 0$.

2.3.1. Controlador prácticamente óptimo y robusto

En el contexto de este estudio se dice que un controlador práctico tiene la cualidad de ser prácticamente óptimo (**practi-óptimo**) y robusto contra una perturbación o incertidumbre dada si, aún en su presencia, la trayectoria del proceso controlado sigue siendo practi-óptima.

2.3.2. Controlador seguro robusto

Se dice que un controlador práctico para los procesos estudiados tiene la cualidad de ser seguramente robusto si ante una incertidumbre paramétrica grave, no simétrica pero acotada, en el valor de la concentración tóxica del sustrato en el influente, la trayectoria del proceso real resulta ser **segura**. Una trayectoria es segura si vive en la **zona de seguridad** (Ω_{sgt}), proyectada en la Figura 2.13 y definida por

$$\Omega_{sgr} = \{ \mathbf{w} \in \Omega \mid S < S_{sgr} \}$$

ó, equivalentemente,

$$\Omega_{sgr} = \{ \mathbf{w} \in \Omega \mid S \in (S \in \mathcal{R} / (\mu(S) \geq p_{sgr} \mu^*) \vee (S < S^*)) \}$$

donde S_{sgr} es la máxima concentración de sustrato en el *SBR*, incluido un margen de tolerancia, en la cual se decide por diseño que la biomasa puede trabajar con total seguridad *i.e.* la inhibición es totalmente reversible sin necesidad de re-aclimatación.

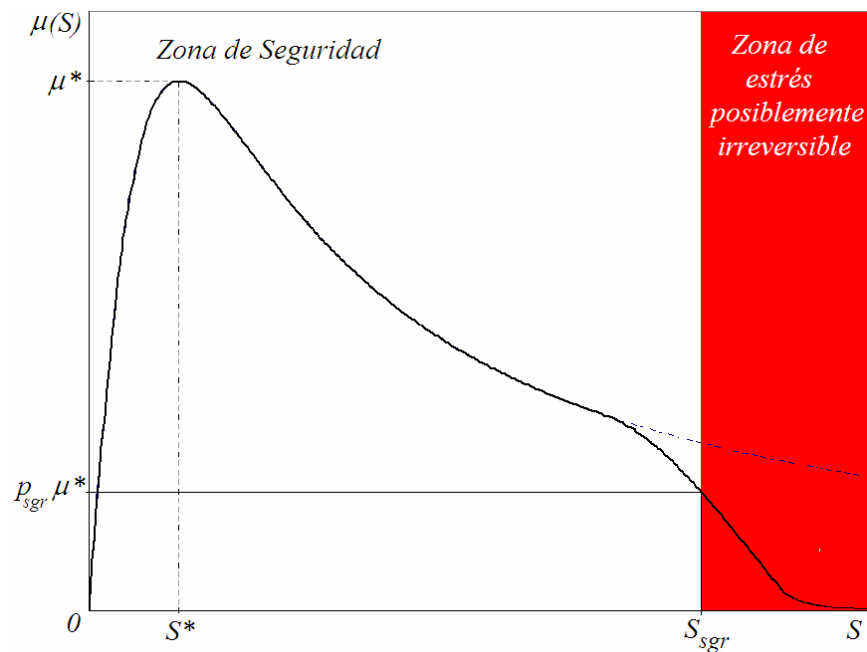


Figura 2.13. Zona de operación del proceso segura para la biomasa.

2.3.3. Grados de robustez

Se definen aquí diferentes grados de robustez, la cual debe estar referida a un caso específico, p.ej. **robustez contra** la incertidumbre de cierta magnitud en algún parámetro o contra una perturbación en alguna otra variable dada.

A continuación se proponen adjetivos para cada grado de robustez:

Definición 2.10. La **robustez** es **total**, contra variaciones o perturbaciones de λ , si, siendo su incertidumbre total (Definición 2.9), esta no tienen efecto adverso en la practi-optimalidad de la trayectoria generada por el controlador *i.e.* el controlador no necesita saber el valor cierto (λ) para actuar.

Definición 2.11. La **robustez total** es **marginal**, de margen m , contra variaciones o perturbaciones de λ , si una incertidumbre simétrica acotada por $\chi(\underline{\lambda}) \in (0, m)$ no tiene ningún efecto adverso en la practi-optimalidad de la trayectoria generada por el controlador. Pero, cuando dicha cota sea violada, el efecto puede ser indeseado y abrupto, pudiendo incluso conducir al mal funcionamiento del controlador.

Definición 2.12 La **robustez** es **parcial**, contra variaciones o perturbaciones de λ , si la incertidumbre simétrica acotada $\chi(\underline{\lambda}) \in (0, 1)$ tiene un efecto indeseado, pero acotado, en la optimalidad de la trayectoria generada por el controlador.

Definición 2.13 La **robustez parcial** es **marginal**, de margen m , contra variaciones o perturbaciones de λ , si una incertidumbre simétrica acotada por $\chi(\underline{\lambda}) \in (0, m)$ tiene un efecto parcial, acotado, en la optimalidad de la trayectoria generada por el controlador. Pero, cuando la cota m sea violada, el efecto puede ser indeseado y abrupto, pudiendo incluso conducir al mal funcionamiento del controlador.

3. CONTROL ÓPTIMO Y ROBUSTO MEDIANTE DETECCIÓN DE EVENTOS (*ED-TOC*)

En este capítulo se explica la idea fundamental del control *ED-TOC* (del inglés *Event Driven Time Optimal Control*) nominal en su forma básica, el cual permite resolver la mayor parte de los retos planteados en la introducción. Sin embargo esa primera versión requiere medir S en el tanque del *SBR* y conocer a $\mu(S)$ perfectamente. Por tanto, posteriormente, se desarrollan algoritmos de **detección de eventos por software** (*E-SS* del inglés *Events Software Sensor*) que permiten eliminar dichos requerimientos, cambiándolos por el cálculo de una función de $\mu_f(t)$ general, la cual se supone medible. La manera de satisfacer dicho supuesto en la práctica se estudiará luego, para cada tipo de reactor, en los capítulos siguientes. Para finalizar este capítulo se analizará la robustez del *ED-TOC* ante la presencia de incertidumbres y de errores en el *E-SS*.

3.1. *ED-TOC* nominal básico

El funcionamiento del *ED-TOC* nominal se ilustra en la Figura 3.1. Esta muestra la proyección de la trayectoria del estado del proceso en el plano Sustrato-Volumen (SV).

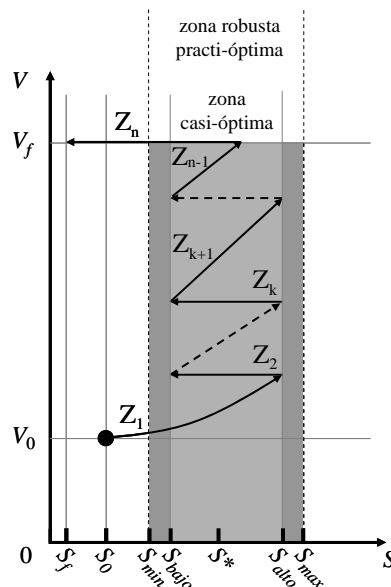


Figura 3.1. Trayectoria-SV del *ED-TOC* nominal.

El *ED-TOC* manipulada la entrada (Q) del proceso de forma *bang-bang* (*ON/OFF*) y por tanto la trayectoria en la Figura 3.1 se compone de dos tipos de **segmentos** (Z):

- Segmentos tipo *OFF* ($Q=0$). Se generan cuando no hay llenado y por tanto, dada la dinámica natural del proceso, viajan horizontalmente *i.e.* V no cambia y S disminuye al ser procesado por la biomasa. p.ej. $Z_2, \dots, Z_k, \dots, Z_n$.
- Segmentos tipo *ON* ($Q = Q_{max} > 0$). Se generan con el flujo de llenado máximo y por tanto, gracias a la Condición 2.8 (mejorabilidad, pág. 50), se puede garantizar que evolucionan siempre en dirección creciente tanto de S como de V . p.ej. Z_1, \dots, Z_{n-1} .

3.1.1. Trayectoria zigzag casi-óptima del *ED-TOC*

La idea fundamental del *ED-TOC* en la Figura 3.1 es realizar **exactamente** el arco inicial (Z_1) y final (Z_n) de la trayectoria óptima nominal y aproximar el arco singular mediante un **zigzag** (Z_2, \dots, Z_{n-1}) que, además de ser practi-óptimo, sea también casi-óptimo. La idea de exigir una condición de casi-óptimalidad al controlador nominal, más fuerte que la practi-optimalidad, es dejar un margen de error para la implementación posterior del control práctico, tal que la trayectoria práctica pueda vivir dentro de la zona practi-óptima aún si falla en permanecer dentro de la casi-óptima nominal.

Los parámetros S_{bajo} , S_{alto} , S^* , S_f y V_f son necesarios para sintonizar dicho controlador. S_{bajo} y S_{alto} definen la zona casi-óptima de la Figura 3.1. Para garantizar que el zigzag así generado, también con acciones *bang-bang*, viva en Ω_{sng} (zona practi-óptima), se recurre a una manera de definir dichos valores usando la misma técnica que fue utilizada para definir la zona practi-óptima: se seleccionan $S_{bajo} \leq S_{alto}$ como las soluciones a $\mu(S) = P\mu^*$, para un índice de conmutación $P \in (p_{sng}, 1)$ tal como lo representa la Figura 3.2. Nota: El valor límite de $P = 1$ no es considerado de interés en este primer análisis pues restringe las trayectorias posibles a una sola, la óptima nominal, y esta no puede realizarse exactamente con un control *bang-bang* como el *ED-TOC* nominal.

Si se dispusiese de la medición de S entonces la implementación del *ED-TOC* nominal se podría describir de manera sencilla: como una **máquina de estados finitos** (Σ) la cual manipula el encendido y apagado del actuador de flujo (Q).

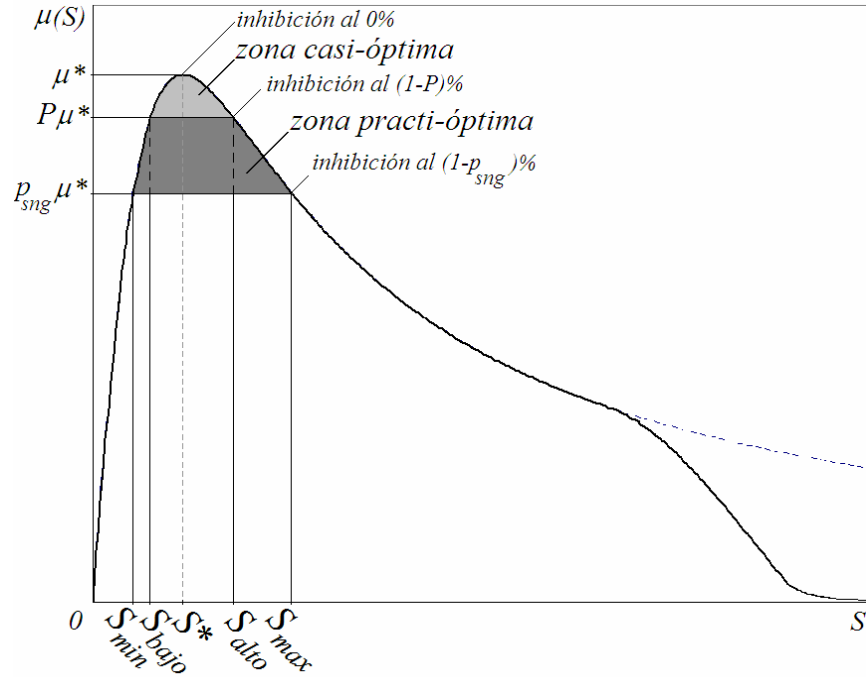


Figura 3.2. Región casi-óptima del *ED-TOC* nominal
(nominalmente contenida en la practi-óptima).

3.1.2. Máquina de estados finitos (Σ) para representar el *ED-TOC*

Antes de iniciar esta sub-sección es importante aclarar los conceptos asociados a la palabra “estado”. Hasta ahora se ha mencionado el **estado del proceso**, indicando un vector de variables analógicas continuas (p.ej. $\mathbf{z}^T = [X, S, V, O]$ para la Clase B). El **espacio de estado** es el lugar geométrico donde vive ese vector, y las **trayectorias** son el grafo que producen allí al evolucionar en el tiempo. En adelante, siempre que se haga referencia al estado del proceso, se entenderá que es ese **estado continuo**. Otro concepto muy diferente es el del **estado lógico** del controlador, el cual se definirá a continuación. Será referido como **estado del controlador** o simplemente **estado** cuando sea evidente que se trata del controlador *i.e.* cuando no haya posible lugar a confusiones con el estado del proceso.

La representación del *ED-TOC* como una **máquina de estados finitos** (Σ) se compone de una cantidad (finita) de **estados lógicos** (σ_j), cada uno de los cuales puede realizar una acción específica muy simple (p.ej. detener el llenado), y de una cantidad (finita) de **eventos** ($e_{j,i}$) los cuales controlan la dinámica de las transiciones entre

los estados. En la Figura 3.3 cada **estado** (del control) es representado por un círculo. Su nombre se encuentra en su interior y, la acción que realiza, debajo del mismo. La Tabla 3.1 describe dichos estados y sus acciones.

Σ se caracteriza porque solamente uno de sus estados puede estar activo en un instante dado (son excluyentes). La **transición** de la actividad de un estado a otro se produce luego de que un evento ($e_{j,l}$) así lo indica, donde j representa el estado de procedencia (σ_j), y l el de destino (σ_l). En la Figura 3.3 los eventos se representan por flechas. Su designación se coloca al lado de la flecha y su significado entre paréntesis. La Tabla 3.2 describe los eventos que dirigen el funcionamiento del *ED-TOC* nominal.

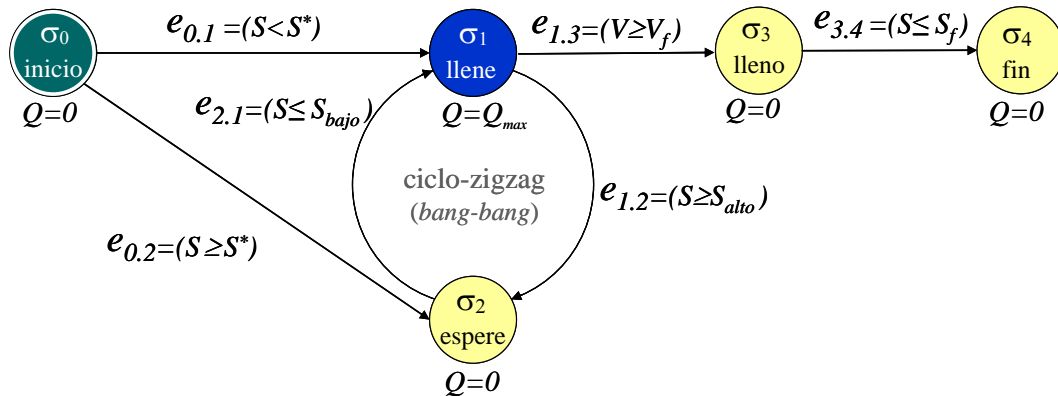


Figura 3.3. Diagrama *ED-TOC*: Máquina de Estados Finitos (Σ) nominal.

Tabla 3.1. Estados lógicos (σ) de la máquina nominal de estados finitos (Σ) *ED-TOC*

Estado	Mnemónico	Descripción de la actividad realizada por el estado	Acción de Control
σ_0	inicio	Es el estado previo al inicio del llenado y reacción <i>i.e.</i> para $t \leq t_0$	$Q = 0$
σ_1	lleno	Llena hasta que se produce un $(1-P)\%$ de inhibición (ver Figura 3.2).	$Q = Q_{max}$
σ_2	espere	Espera a que la actividad (no inhibida) se reduzca en un $(1-P)\%$.	$Q = 0$
σ_3	lleno	Último arco. Espera el cumplimiento de la meta con el tanque lleno.	$Q = 0$
σ_4	fin	Meta cumplida. Puede ir a la siguiente fase del <i>SBR i.e.</i> sedimentación.	$Q = 0$

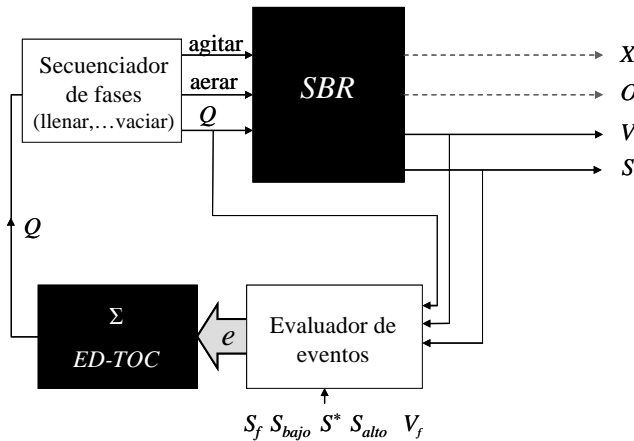
Tabla 3.2. Eventos nominales (e) de la máquina (Σ) para el *ED-TOC*

Evento	Significado	Descripción breve
$e_{0,1}$	$S \leq S^*$	no existe inhibición *
$e_{0,2}$	$S > S^*$	existe inhibición **
$e_{1,2}$	$S > S_{alto}$	existe inhibición y el proceso abandonó la zona casi-óptima
$e_{1,3}$	$V \geq V_f$	el tanque se ha llenado (o estaba ya lleno)
$e_{2,1}$	$S < S_{bajo}$	no existe inhibición pero el proceso abandonó la zona casi-óptima
$e_{3,4}$	$S < S_f$	se ha ingresado al conjunto de meta <i>i.e.</i> puede terminarse el proceso

* El estado del proceso se encuentra a la **izquierda** de la superficie singular *i.e.* del lado del origen.

** El estado del proceso se encuentra a la **derecha** de la superficie singular.

El esquema del control del proceso, incluyendo las secuenciación de fases, se muestra en la Figura 3.4. Nótese que solamente se suponen medibles las salidas V y S .

Figura 3.4. Esquema de la conexión entre *SBR* y *ED-TOC*.

3.1.3. Explicación del funcionamiento del *ED-TOC* ($S_0 < S^*$)

Para explicar el funcionamiento de Σ en la Figura 3.3 se usará la trayectoria de la Figura 3.1, la Tabla 3.1 y la Tabla 3.2. Se analizará cada uno de los estados, uno por uno, el tipo de trayectoria que produce, y sus posibles rutas de salida *i.e.* la transición de la actividad a otro estado:

Definición 3.1. Un **evento**, denotado por $e(t)$, es una función lógica binaria. Se le asignará un valor de **1** si es verdadera (activa) y **0** si es falsa (inactiva). Se dice que un evento se **dispara** en el instante en que exista una transición de su valor del 0 al 1 *i.e.* es una discontinuidad del evento. Hasta que no suceda el disparo no es posible que se inicie una transición de estado en Σ a causa del evento en cuestión. Por convención se asume que $e(t) = 0$ para $t < t_0$. Por tanto no existirán transiciones hasta que $t = t_0$.

Definición 3.2. Un **segmento** (Z) es la parte de la trayectoria del proceso generada durante la actividad ininterrumpida de un estado dado de Σ .

Definición 3.3. La $k^{\text{ésima}}$ **transición** sucede en $t = t_k$ poniendo fin al $k^{\text{ésimo}}$ segmento (Z_k) *i.e.* el segmento Z_k se genera durante $t_{k-1} < t \leq t_k$. Como caso particular se tiene la transición cero, la que obliga a abandonar el estado σ_0 en t_0 .

Nótese que, en este esquema, no importa desde cuando estuvo activo σ_0 , ni la forma completa del segmento Z_0 para $t \leq t_0$. Únicamente importa el instante de actividad $t = t_0$, el cual se representa como un segmento en forma de punto *i.e.* el estado inicial \mathbf{z}_0 .

Definición 3.4. En este estudio una **transición** es considerada del tipo ***bang-bang*** si transfiere la actividad entre dos estados que tienen diferentes acciones de control *i.e.* si se produce una conmutación del flujo (Q).

Estado σ_0 (inicio)

El estado inicial (σ_0), *i.e.* el que está activo hasta $t = t_0$, se identifica con un aro blanco interior en la Figura 3.3. El flujo que comanda es nulo independientemente del lado de la superficie singular en que se crea que está ubicado el estado inicial (\mathbf{z}_0) del proceso. Por ejemplo, en una aplicación de PTAR lo normal es este caso, en el cual no existe inhibición previa, *i.e.* \mathbf{z}_0 esté ubicado en el lado izquierdo (incluso $S_0 \approx 0$), pero aún así no se aplicará flujo antes de iniciar la fase de reacción y llenado.

Para este caso, Figura 3.1, en el instante inicial (t_0) se produce la primera transición, debido al disparo de $e_{0,1}$, cediendo la actividad del estado σ_0 al σ_1 y dando por tan-

to inicio al primer segmento tipo $ON(Z_1)$, que corresponde exactamente al primer arco *bang-bang* de la trayectoria óptima nominal (Figura 2.8A).

Estado σ_1 (lleno)

Se supondrá que este estado entra en actividad con la $k^{\text{ésima}}$ transición (en el instante t_k). Eso quiere decir que acaba de terminar el segmento Z_k y justo comienza el Z_{k+1} . Si se analiza el diagrama en la Figura 3.3 es posible determinar que solamente los eventos $e_{0,1}$ o $e_{2,1}$ pudieron ser causa de la activación de este estado. En esas condiciones normales el estado del proceso se ha de encontrar a la izquierda de la superficie singular, en el momento de ingreso, y el tanque aún no está lleno. En dicha situación, y dado que el comando de control es aplicar el máximo flujo, dos cosas pueden suceder: que el tanque alcanza su nivel final (*i.e.* el segmento Z_{k+1} resulta ser en realidad el segmento Z_{n-1} en la Figura 3.1), en cuyo caso se dispara $e_{1,3}$ el cual activa a σ_3 ; o, si las condiciones de S_i y Q_{max} lo permiten, se cruza antes el umbral de disparo de $e_{1,2}$ y se realiza la transición a σ_2 , iniciando con ello un ciclo iterativo (ciclo zigzag). En cualquiera de los dos casos un tiempo finito, mayor que cero, tuvo que transcurrir desde el momento de la activación.

Antes de continuar el análisis es importante verificar lo que sucede si la condición de mejorabilidad no se cumple. En ese caso la superficie singular nunca será alcanzada durante la actividad de σ_1 y por tanto Σ ya nunca pasará a σ_2 . Sin embargo, dado que el flujo está en su máximo valor, en algún tiempo finito el tanque se llenará (disparando $e_{1,3}$) con lo cual Σ pasa al estado σ_3 . Lo importante es observar que Σ no se queda "atrapada" en σ_1 .

Dos precisiones son necesarias: primero, que después de visitar un número finito de veces este estado, finalmente el tanque se llenará; segundo, que aún si las condiciones de entrada a este estado no son las esperadas, *i.e.* el proceso se encuentra a la derecha de la superficie singular o el tanque ya estaba lleno, igualmente la terminación de su actividad sucederá por una de las dos causas ya explicadas, de nuevo en tiempo finito.

Estado σ_2 (espere)

Se puede ingresar a este estado desde σ_0 o desde σ_1 y por tanto es de esperarse que el estado del proceso se encuentre a la derecha ($S > S^*$) de la superficie singular en el momento de ingreso. Supóngase (simplemente por conveniencia gráfica en la Figura 3.1) que justo comienza el segmento Z_k (*i.e.* acaba de terminar el Z_{k-1}). El flujo de entrada se apaga y por tanto el sustrato empieza a desaparecer del sistema, tardando un tiempo finito en cruzar la superficie singular y llegar hasta $S = S_{bajo}$. En este estado hay una única ruta de salida (la marcada por $e_{2,1}$) la cual se dispara, luego de dicho tiempo de espera finito, justo cuando el proceso abandona la zona casi-óptima, transfiriendo la actividad al estado σ_1 y posibilitando así el establecimiento de un ciclo iterativo entre estos dos estados.

Si por alguna razón, al ingresar, el estado del proceso no se encontraba donde se esperaba, sino del lado izquierdo y por fuera de la zona casi-óptima, de todas formas se disparará $e_{2,1}$ y por tanto se continuará, a partir de allí, con el correcto control del proceso.

Es importante precisar que el ciclo iterativo que puede establecerse entre σ_1 y σ_2 tiene un final en tiempo finito dado que, como se explicó anteriormente, un número finito de visitas al estado σ_1 garantizan el llenado del tanque y por tanto se garantiza también la interrupción del ciclo iterativo en σ_1 , al no regresar más a σ_2 .

Estado σ_3 (lleno)

Este estado es el responsable de generar el segmento Z_n en la Figura 3.1, el cual es el último segmento y es el que ejecuta exactamente, a partir de su salida de la zona practi-óptima, al último arco *bang-bang* de la trayectoria óptima nominal. Este arco, siempre que $S_f > 0$, también se completa en tiempo finito.

Estado σ_4 (fin)

Una vez en este estado el *ED-TOC* se detiene y el relevo se pasa a la siguiente fase de la secuencia del *SBR*, *i.e.* sedimentación (no se muestra en las gráficas).

3.1.4. Explicación del funcionamiento del *ED-TOC* ($S_0 \geq S^*$)

En este caso el proceso inicia a la derecha de la superficie singular, y su comportamiento es similar al del caso anterior:

Estado σ_0 (inicio)

Este caso puede presentarse, p.ej., en una aplicación productora de biomasa en la que, por razones de proceso, se prefiera iniciar la reacción con una concentración de sustrato que produzca un choque inhibitorio suave antes de iniciar el llenado ($S_0 > S^*$). De igual forma al caso anterior no se aplica flujo antes de iniciar oficialmente la fase de reacción.

En el momento (t_0) inicial se dispara el evento $e_{0,2}$. Por tanto se genera la transición de actividad de σ_0 a σ_2 , iniciando el primer segmento de la trayectoria zigzag, que correspondería exactamente al primer arco *bang-bang OFF* de la trayectoria óptima nominal (Figura 2.8B).

Estados σ_1 (llene), σ_2 (espere), σ_3 (lleno) y σ_4 (fin)

La explicación de estos estados es igual que la de la sub-sección 3.1.3 (pág. 65).

3.1.5. Propiedades generales del *ED-TOC*

Del análisis en las sub-secciones 3.1.3 y 3.1.4 se desprenden varias conclusiones acerca del funcionamiento del *ED-TOC*:

Estado inicial único y coherente

Existe un único estado inicial general (σ_0) de entrada a Σ , definido por diseño, que se visita una sola vez en cada ejecución de Σ . Su acción es de reposo en espera del inicio de la fase del bioproceso (llenado y reacción) que requiere del control *ED-TOC*.

Lapso de activación acotado para cada estado

En ningún caso el sistema se queda indefinidamente en un estado dado (*i.e.* el tiempo de permanencia en activación de un estado, cada vez que es invocado, es finito), excepto quizás (por supuesto) en el de finalización. Adicionalmente cada estado tiene un tiempo mínimo de permanencia en condiciones normales. Esto garantiza que

no hay infinitas conmutaciones en Σ durante un lapso de tiempo finito y que el tránsito del estado inicial al final se da en tiempo finito.

Ciclo iterativo *bang-bang*

Un ciclo iterativo puede establecerse entre σ_1 y σ_2 , el cual permite generar la trayectoria practi-óptima de segmentos zigzagantes. Dicho ciclo zigzag siempre expira cuando el tanque termine por llenarse (durante σ_1). De hecho, cada nuevo segmento tipo *ON* (de llenado) dosifica más cantidad de influente que el anterior. Esto se explica dado que al comenzar un nuevo segmento, puesto que V es mayor que la vez anterior, la dilución instantánea durante el llenado ($D = Q_{max}/V$) será menor, y por tanto le tomará al mismo flujo (Q_{max}) más tiempo lograr el mismo efecto, que antes, sobre S . En conclusión, el número de veces que se visita dicho estado es finito para V_f finito.

Estado final único alcanzado en tiempo finito

El estado final es único (σ_4) y siempre es alcanzado en tiempo finito y por única y última vez en cada ejecución de Σ *i.e.* en cada tanda de proceso.

Robustez parcial

Una implementación práctica del *ED-TOC* nominal, tal cual, dependería de las mediciones de S y de V , así como de parámetros asociados a μ . Por tanto perturbaciones en dichas medidas y/o identificaciones perturbarían el funcionamiento de dicho *ED-TOC* práctico con respecto al nominal. Sin embargo, si las incertidumbres en las perturbaciones son acotadas, estas tendrán apenas un efecto acotado en el desempeño del proceso. Para explicar esta afirmación analícese p.ej. el efecto que un error en la asignación práctica de los parámetros \underline{S}_f , \underline{S}_{bajo} , \underline{S}^* , \underline{S}_{alto} tendría en las zonas de la Figura 3.1. Generaría una traslación, y posiblemente una deformación, de la zona casi-óptima práctica por fuera de la zona practi-óptima nominal, como se muestra en la Figura 3.5. Aún así el proceso efectuaría la aproximación del arco singular dentro de un tubo finito y cercano al deseado. Dicha situación indeseable no se presentaría si fuese posible garantizar un acotamiento tal que $S^-_{bajo} > S_{min}$ y que $S^+_{alto} < S_{max}$ pues entonces la zona casi-óptima práctica seguiría estando contenida en la zona practi-óptima nominal *i.e.* no se perdería la practi-optimalidad de la Figura 3.1.

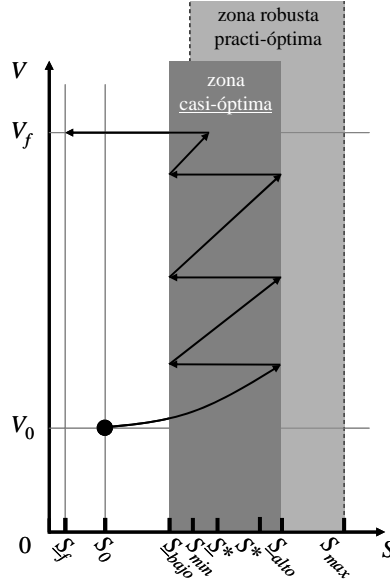


Figura 3.5. Trayectoria-SV del ED-TOC práctico ante errores (desconocidos) en sus parámetros (los subrayados).

De manera similar, un ruido o un error sistemático de medición en S , p.ej. una descalibración lineal del sensor, tendría un efecto equivalente de desplazamiento y/o contracción de la zona casi-óptima. En ese caso, una condición suficiente para conservar la practi-optimalidad sería que la perturbación en S esté acotada de modo que, cuando la señal medida sea $\underline{S} = \underline{S}_{bajo}$, i.e. el valor que produce la transición práctica, entonces $S^- \geq S_{min}$, i.e. genera la transición dentro de la zona practi-óptima, y que, cuando $\underline{S} = \underline{S}_{alto}$ entonces $S^+ \leq S_{max}$. Usando la Definición 2.8 (pág. 58) esta situación equivale a que $\chi^-(\underline{S}) < 1 - S_{min}/\underline{S}_{bajo}$ y $\chi^+(\underline{S}) < S_{max}/\underline{S}_{alto} - 1$.

Robustez total

Una implementación práctica del ED-TOC nominal no depende de los siguientes parámetros y variables, y por tanto es totalmente robusta en contra de incertidumbres o perturbaciones en los mismos: $b, k_1, k_2, k_L a, Q_{max}, O_{sat}, O_0, X_0, V_0, S_0, S_i, X, O$

Robustez segura

Dado que el controlador es totalmente robusto contra incertidumbres totales en S_i también es seguro siempre que la incertidumbre en \underline{S}_{alto} esté acotada por $S^+_{alto} < S_{sgr}$, lo cual es una condición natural dado que, normalmente, $S_{sgr} \gg S^*$ (Figura 2.13) y entonces es posible escoger a $\underline{S}_{alto} \ll S_{sgr}$ suficientemente cerca de \underline{S}^* .

Recuperación ante transiciones anormales

Aún si por alguna razón desconocida las condiciones de entrada a un estado dado no son las esperadas, el funcionamiento global del *ED-TOC* nominal no se perturba más allá de dicho evento particular *i.e.* la siguiente transición recupera la ruta nominal. Una excepción sucedería si fuese el estado final el que se alcanzare por error. En la implementación práctica, que se propondrá más adelante, se evidenciará que justamente la transición al estado final es la más robusta de todas.

Desempeño óptimo y robusto en ausencia de mejorabilidad

Si la condición de mejorabilidad no se cumple, entonces la trayectoria de tiempo óptimo no incluye un arco singular. Por tanto no es necesario aproximarlos. Aún así el *ED-TOC* realizará, igual que lo hace cuando dicho arco singular existe, correctamente los arcos *bang-bang* inicial y final. Ese sería el caso, p.ej., tanto cuando la concentración del influente inhibitorio resulta insuficiente para causar el efecto bola de nieve ($S_i \leq S^*$) como cuando se usa un sustrato no inhibitorio ($S^* \rightarrow \infty$), dado que en ambos casos la trayectoria de tiempo óptimo coincide con la de la operación tipo lote, *i.e.* se llena en un sólo arco inicial, usando el máximo flujo.

3.2. Detector robusto de eventos con *software-sensors* (*E-SS*)

En esta sección se explicará cómo eliminar la necesidad de medir S y de evitar la dependencia de los valores de S_{bajo} , S^* y S_{alto} en el *ED-TOC* nominal presentado en la Sección 3.1. Esta adición de un *E-SS* brindará aún mayor robustez y aplicabilidad al *ED-TOC* pues, como se recordará de la introducción, los sensores de S no están disponibles para ciertos casos de manera que puedan ser usados en línea, y los parámetros asociados a μ (p.ej. S_{bajo} , S^* y S_{alto}) son difíciles de identificar y presentan alta variabilidad.

Para diseñar el *E-SS* nominal se supone que una cierta función lineal de μ

$$\gamma := f(\mu_t) = \beta \mu_t \quad (3.1)$$

existe y que cumple la

Condición 3.1. $f(\mu_t)$ en el lado izquierdo de la ecuación (3.1) es computable en línea a partir de las mediciones disponibles. En el lado derecho β es una constante positiva y finita pero desconocida *i.e.* la incertidumbre en su valor es total pero, sea cual sea, su comportamiento es invariante en el tiempo.

Para el caso de reactores de la Clase A, p.ej., al multiplicar ambas variables medibles el resultado es $\gamma = \gamma_{PG}V$ que, usando la ecuación (2.7) y recordando que la biomasa total es $B = XV$, se convierte en $\gamma = k_{PG}B\mu_t$. Si además el proceso es del tipo degradador de sustrato entonces B es casi constante y por tanto γ se aproxima a dicha condición anterior. En ese caso se considerará el crecimiento (pequeño) de la biomasa como una perturbación de la condición nominal y se estudiará su efecto y la manera de minimizarlo. Una situación similar se da también para la Clase B, aunque la aproximación de γ ya no resultará ser tan buena, pues el crecimiento de la biomasa resulta apreciable. Las particularidades de dichos casos prácticos, para cada clase, se analizarán más adelante, en el capítulo correspondiente a cada una.

La Figura 3.6 esquematiza la inclusión de un *E-SS* para alimentar el *ED-TOC*. Dicho *E-SS* utiliza la satisfacción de la Condición 3.1 para detectar los eventos, originalmente dependientes de S , utilizando las funciones (ε) descritas en la Tabla 3.3 y que no dependen ya de S .

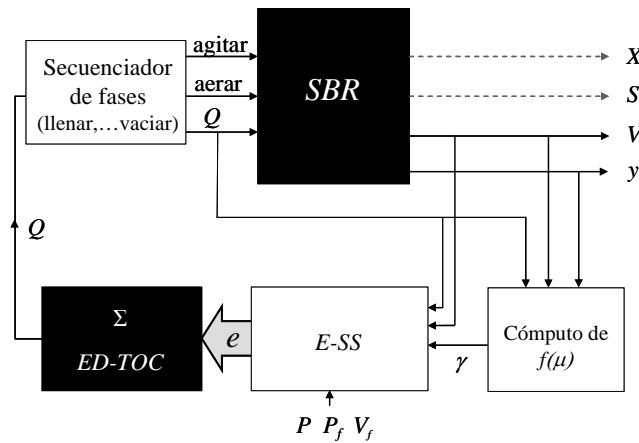


Figura 3.6. Esquema de la conexión proceso-controlador.

Tabla 3.3. *E-SS*: Detector de Eventos (de la Tabla 3.2) por *software* usando $\gamma = f(\mu_t)$

Evento	Significado	Función lógica para detección* del evento
$e_{0,1}$	$\underline{S} \leq \underline{S}^*$	$\varepsilon_{0,1} = \text{not}(flag_{inhib,0})$
$e_{0,2}$	$\underline{S} > \underline{S}^*$	$\varepsilon_{0,2} = flag_{inhib,0}$
$e_{1,2}$	$S > S_{alto}$	$\varepsilon_{1,2} = [(d\gamma/dt < 0) \wedge (\gamma < P\gamma^*)]$
$e_{1,3}$	$V \geq V_f$	$\varepsilon_{1,2} = (V \geq V_f)$
$e_{2,1}$	$S < S_{bajo}$	$\varepsilon_{2,1} = [(d\gamma/dt < 0) \wedge (\gamma < P\gamma^*)] \vee (\gamma = 0)$
$e_{3,4}$	$S < S_f$	$\varepsilon_{3,4} = [(d\gamma/dt < 0) \wedge (\gamma < P_f\gamma^*)]$

*Se detectan únicamente los eventos que dependen de S . Los que dependen de V se calculan directamente a partir de sus mediciones.
Nota: El símbolo \wedge representa el operador “y” y \vee el “o”.

En la Tabla 3.3 existen tres parámetros de sintonía para el *E-SS*. El primero es una bandera que representa la programación que hace el usuario del inicio del proceso en función de la condición inicial esperada *i.e.* $flag_{inhib,0} := (\underline{S} > \underline{S}^*)$. Un valor verdadero (1) indica que existe inhibición de la biomasa en t_0 *i.e.* \mathbf{z}_0 se encuentra a la derecha de la superficie singular. Un valor falso (0) indica que no existe inhibición inicial *i.e.* \mathbf{z}_0 se encuentra en la superficie singular o a la izquierda de ella. Los otros dos parámetros pueden seleccionarse como $P \in [p_{sng}, 1)$ y $P_f \in (0, p_f]$ y definen, respectivamente, las superficies de conmutación *bang-bang* y parte de la superficie de meta del proceso. La cota $p_f = \mu(S_f)/\mu^*$ es un indicador de la condición en que la meta del proceso se cumple, dado previamente que $V = V_f$.

Las funciones ε se apoyan en la Condición 2.8, especialmente en el supuesto de que S siempre crece cuando existe flujo de entrada ($Q = Q_{max}$), lo cual es una condición natural del problema. Dicha condición, combinada con la Condición 2.7 para la forma inhibitoria de μ , y la Condición 3.1, garantizan que el signo de la derivada de γ es igual al de la derivada de μ_t . Esto permite determinar de cuál lado de la superficie singular se encuentra el estado del proceso. De igual manera se puede determinar dicho lado para el caso en que no exista flujo ($Q = 0$), usando esa misma derivada, dado que en ese caso se sabe que S siempre decrece monótonamente a cero.

Nótese que $e_{0,1}$ y $e_{0,2}$ han sido calculados con la información proveniente del usuario en cuanto al estado inicial típico del proceso ($flag_{inhib,0}$), la cual es en general confia-

ble. Aunque es teóricamente posible detectar dichos eventos de manera similar a los demás, resultarían ser tan poco robustos en la práctica, por utilizar únicamente la derivada de γ , que se prefiere no considerar esa solución nominal. Otra razón para aceptar la información contenida en $flag_{inhib,0}$ es que, aún si esta fuese inadecuada, el error cometido es corregido por el *ED-TOC* en el primer segmento.

Todos los otros eventos detectables en la Tabla 3.3 dependen también de la (problemática) derivada de γ *i.e.* dependen de la correcta determinación del lado de la superficie singular en el cual se encuentra el proceso. Pero, además, dependen de una comparación con su máximo (γ^*) lo cual, como se verá más adelante, les brinda robustez al eliminar, de paso, la necesidad de la derivada. Un problema a resolver es que dicho máximo es, a priori, desconocido. Por tal razón es necesario diseñar un método para estimarlo. Una primera propuesta para un estimador nominal de γ^* es representada por la ecuación

$$\underline{\gamma}^*(t) = \max_{[t_0, t]}(\gamma) \quad , \quad (3.2)^1$$

la cual es fácilmente implementable por *software* como un detector de pico positivo. Nótese que el estimado $\underline{\gamma}^*$ convergerá exactamente a γ^* desde el momento en que por primera vez γ alcance su máximo, lo cual sucede siempre antes de presentarse el efecto bola de nieve *i.e.* la convergencia se da antes de que dicho valor sea necesitado por el *E-SS*.

3.2.1. Optimalidad y Robustez total, parcial y segura.

El *ED-TOC* usando el *E-SS* de la Tabla 3.3 no depende de mediciones de S ni de parámetros asociados a μ . Tampoco depende explícitamente de ningún otro parámetro (a menos que éste entre, implícitamente, en el cálculo de γ). Por tanto puede decirse que, si se cumplen las condiciones especificadas, el *ED-TOC* se comporta de manera prácticamente óptima y totalmente robusta ante incertidumbres totales en todos sus parámetros p.ej. nunca podría presentarse una situación como la esquematizada en la Figura 3.5.

¹ En este caso el subrayado indica que se estima e incluye incertidumbres. Ver Nomenclatura (pág 13).

En el caso de no cumplirse la condición de mejorabilidad, aún así el proceso nunca correría peligro, *i.e.* sería seguro, pues el máximo error posible en ese caso consiste quizás en determinar, erradamente, que el sistema se encuentra en la zona derecha de la superficie singular cuando en realidad está en la zona izquierda (y en ese caso el flujo sería apagado de todos modos). Pero luego, cuando se cumplan las condiciones apropiadas, sería encendido de nuevo. Permanecería en ese estado cuando comience a cumplirse la condición de que la derivada de S sea positiva, lo cual, si el proceso no es mejorable, solamente podrá suceder al lado izquierdo de la superficie singular, nunca en el lado derecho.

Todas las demás características deseables ya analizadas del *ED-TOC* se conservan, *i.e.* se puede aproximar la trayectoria de tiempo óptimo tan bien como se desee, siempre y cuando la condición de inicio ($flag_{inhib.0}$) se estipule correctamente.

3.2.2. Respuesta y recuperación ante errores en $flag_{inhib.0}$.

La selección adecuada del valor para $flag_{inhib.0}$ depende del tipo de proceso. Por tanto no es probable que exista error en ella, a menos que se de una condición anormal, o de falla, en el proceso. Pero si dicha condición llegase a presentarse, el *ED-TOC* corregiría el problema con una pérdida de tiempo pequeña.

Dos situaciones de error pueden ocurrir:

- 1) El primer caso de error se presenta cuando \mathbf{z}_0 se encuentra a la izquierda de la superficie singular y la sintonía fue realizada para que $flag_{inhib.0} = 1$. En consecuencia el primer segmento generado lo producirá σ_2 . Dicho segmento es por tanto del tipo *OFF* (horizontal) y se alejará de la superficie singular, incluso si \mathbf{z}_0 estaba ya fuera de la zona practi-óptima. Esto quiere decir que el primer arco de la solución nominal no se realizará exactamente y también quiere decir que γ decrece. Por tanto el estimado (γ^*) nunca alcanzará el valor real (γ^*) durante dicho segmento pero, usando la ecuación (3.2), será igual al valor inicial de γ (*i.e.* $\gamma^* = \gamma_0$). Analizando la Tabla 3.3 es fácil ver que el evento $e_{2.1}$ se disparará cuando $\gamma < P\gamma_0$ *i.e.* en un tiempo finito. Una vez esto suceda σ_1 se encargará de efectuar el arco inicial de la solución nominal y el resto de la trayectoria será independiente del (pequeño) error inicial.

2) El segundo caso se presenta cuando z_0 se encuentra a la derecha de la superficie singular y la sintonía fue realizada para que $flag_{inhib.0} = 0$. El análisis es similar al anterior, excepto que debe considerarse un elemento adicional: la seguridad del proceso. Si el proceso inicia demasiado cerca de la zona de falla, es posible que transgreda la zona de seguridad antes de corregir el error de sintonía. Por tanto es necesario establecer un valor máximo para S_0 a fin de garantizar la seguridad del proceso. Analizando la Tabla 3.3 es fácil ver que el evento $e_{1,2}$, el cual corregirá el error inicial, se disparará cuando $\gamma < P\gamma_0$. Pero, dado que se desea una operación inicial segura, en ningún caso se debe dar que $\gamma < P_{seg}\gamma^*$. De aquí, y usando la Figura 3.7, se desprende la

Condición 3.2. Para garantizar un arranque seguro es necesario que $S_0 \leq S_{0,max}$, donde

$S_{0,max} > S^*$ se define, según la Figura 3.7, como

$$S_{0,max} = \begin{cases} S_{sgr} & \text{si } Q_0 = 0 \quad \text{con } p_{sgr} = \frac{\mu(S_{sgr})}{\mu^*} \\ S_{p0} & \text{si } Q_0 = Q_{max} \quad \text{con } p_0 = \frac{\mu(S_{p0})}{\mu^*} \end{cases}$$

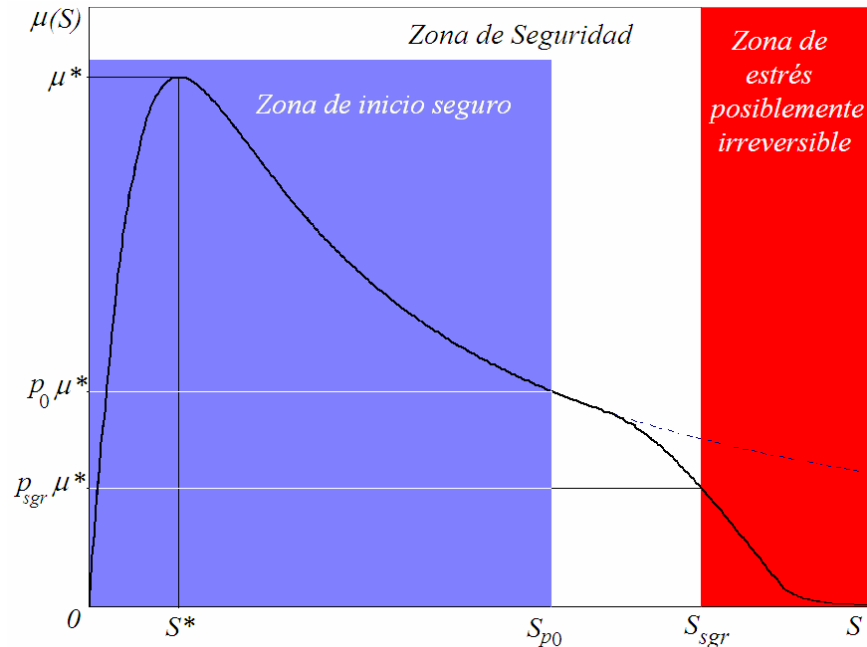


Figura 3.7. Zona de inicio segura aún ante errores del usuario en $flag_{inhib.0}$

3.2.3. Evaluación de los siete retos.

Se procederá a verificar cuáles de los retos planteados en la introducción permiten cumplir la combinación del *ED-TOC* y el *E-SS*:

- Reto 1: Se cumple. El control es arbitrariamente cercano al óptimo (practi-óptimo) en el sentido de tiempo mínimo.
- Reto 2: Se cumple. El control detecta automáticamente el cumplimiento de la meta del proceso.
- Reto 3: Se cumple parcialmente. No se requiere medir concentraciones de biomasa ni de sustrato. Sin embargo aún no se explica cómo usar (únicamente) las mediciones disponibles para calcular γ . Esto se hará más adelante en los siguientes capítulos, para cada clase y tipo de proceso, con lo cual el reto se terminará cumpliendo a cabalidad.
- Reto 4: Se cumple: El control es robusto y seguro.
- Reto 5: Se cumple: No necesita medir la concentración del sustrato en el influente.
- Reto 6: Se cumple: No es necesario conocer exactamente el modelo del crecimiento de la biomasa. Aún si su estructura es no inhibitoria el proceso será operado adecuadamente.
- Reto 7: Se cumple: No se requiere ningún parámetro del modelo; por tanto las incertidumbres paramétricas de los mismos no son problema.

3.3. Errores y robustez de la combinación *E-SS & ED-TOC*

Debe notarse que, para el *ED-TOC*, la característica más importante de un evento es su disparo, *i.e.* el momento en el cual la transición de 0 a 1 ocurre (Definición 3.1, pág. 66), pues es justamente ese el instante en que una transición de estado debe ser comandada. Por lo tanto, un **error de detección** de un evento se define como la diferencia de tiempos entre la ocurrencia del evento nominal, *i.e.* en el modelo proceso-controlador nominal tal como el explicado en la Sección 3.2 (Figura 3.6), y su ocurren-

cia práctica. En este último caso existen incertidumbres (perturbaciones y/o ruidos) en las mediciones usadas para el cálculo de γ , las cuales son fuente de los errores de detección. Se estudiarán a continuación los posibles tipos de errores en la detección de los eventos pero, antes, algunas definiciones relacionadas con la Figura 3.1.

Definición 3.5. Un **zigzag** es la concatenación de al menos dos segmentos generados por el ciclo iterativo formado entre σ_1 y σ_2 y que hacen parte de la aproximación del arco singular óptimo nominal. Nótese que el zigzag es la única parte de la trayectoria susceptible de ser afectada significativamente por errores de detección.

Definición 3.6. Una trayectoria es **envolvente** cuando **revolotea** (en inglés *to hover*) sobre la zona casi-óptima *i.e.* si todos los segmentos del zigzag tocan la zona casi-óptima, como en el caso de la Figura 3.8A. En el caso de la Figura 3.8B p.ej. los segmentos Z_4 y Z_5 fallan en tocar la zona casi-óptima y por tanto la trayectoria completa se considera **no envolvente**.

Se dice que un controlador es **envolvente**, o que revolotea, si produce trayectorias envolventes.

Nótese que una trayectoria envolvente es también **practi-óptima** si todos los segmentos del zigzag terminan dentro de la zona practi-óptima. Ese sería el caso p.ej. en la Figura 3.8A si los segmentos Z_1 y Z_{n-2} terminasen dentro de la zona practi-óptima.

Definición 3.7. $T_T > 0$ es el tiempo mínimo de travesía desde una frontera de la zona casi-óptima hasta la opuesta *i.e.* el mínimo tiempo que tarda un segmento (el más rápido) que se origina fuera de la zona casi-óptima en cruzarla luego de reentrar en ella.

Definición 3.8. $T_E > 0$ es el tiempo mínimo de escape *i.e.* el mínimo tiempo que tarda un segmento (el más rápido) que se origina en la frontera de la zona casi-óptima en escapar fuera de la zona practi-óptima.

Definición 3.9. $T_k = t_k - \underline{t}_{k-1}$ es el lapso de tiempo que debería durar el segmento $k^{\text{ésimo}}$ nominal, si no existiese error en el evento que lo terminará, y $\underline{T}_k = \underline{t}_k - \underline{t}_{k-1}$

el lapso de tiempo, medido *a posteriori*, que duró ese segmento práctico en realidad.

Definición 3.10. $E_k = \underline{t}_k - t_k$ es el valor del error de detección del evento que genera la k ésima transición. Un valor de cero indica que no hubo error.

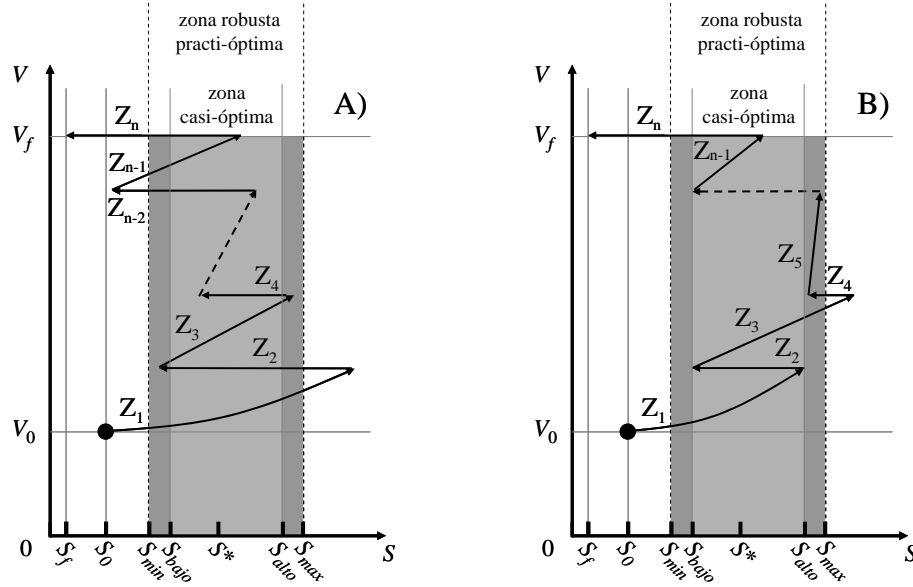


Figura 3.8. Tipos de trayectoria y de errores
 A) Trayectoria Envolvente; B) No envolvente.

3.3.1. Tipos de errores detección en el E-SS

A diferencia de la trayectoria ED-TOC nominal (Figura 3.1), que no contiene errores, una trayectoria práctica (Figura 3.8) puede tener variaciones en sus segmentos (Z_k) debido a errores de detección (E_k respectivamente).

Los errores de detección pueden clasificarse de diversas maneras. De especial interés resulta saber si la detección práctica se adelanta o si se retrasa en el tiempo con respecto a la nominal, y también analizar cuando el error es recurrente o si solamente se presenta esporádicamente:

Definición 3.11. Un error de detección es **retardante** si $E_k > 0$, y es acotado si $E_k < T_E$.

En la Figura 3.8A p.ej. son errores retardantes acotados los experimentados por Z_2 y Z_3 , y retardantes no acotados los de Z_1 y Z_{n-2} .

Definición 3.12. Un error de detección es **anticipante** si $E_k < 0$, acotado si $E_k > -T_T$. En la Figura 3.8A p.ej. hay un sólo error anticipante (en Z_4) y es acotado, mientras que en el caso de la Figura 3.8B ese mismo error anticipante (en Z_4) no está acotado puesto que el segmento termina antes de ingresar a la zona casi-óptima.

Definición 3.13. Un error de detección es **aislado** si las transiciones vecinas están libres de error, *i.e.* $E_{k-1} = 0$ y $E_{k+1} = 0$, y consecutivo o concatenado, si no. Ninguno de los errores en la Figura 3.8 p.ej. es aislado.

3.3.2. Robustez óptima en presencia de errores de detección

Ahora se analizará la forma en que los errores de detección alteran la trayectoria casi-óptima de la Figura 3.1. Supóngase que un error de detección aislado y retardante ocurre justo cuando un segmento zigzag está por terminar *i.e.* justo cuando toca la frontera casi-óptima. Entonces, el segmento nominal será alargado y crecerá (prácticamente) fuera de la zona casi-óptima. Una condición suficiente para garantizar que el segmento considerado no escapará también fuera de la zona practi-óptima es que el error perturbador sea acotado. Si, por el contrario, el error hubiese sido del tipo anticipante, entonces el segmento se hubiera recortado, en vez de alargarse, y hubiera permanecido dentro de la zona casi-óptima. En ambos casos, dada la condición de aislamiento del error, el segmento zigzag siguiente no estará sometido a errores y por tanto buscará terminar nominalmente, es decir tocando la frontera correcta de la zona casi-óptima. Es más, dicho toque se puede garantizar aún si existe un nuevo error, siempre y cuando este nuevo error (concatenado al anterior) sea del tipo retardante. Pero si el nuevo error fuese del tipo anticipante, y el segmento anterior terminó fuera de la zona casi-óptima, entonces no hay garantía alguna de que el nuevo segmento en aproximación revolotee, a menos claro que el error sea acotado.

Usando los análisis anteriores se pueden garantizar los siguientes resultados acerca del comportamiento del *ED-TOC* ante errores:

- Resultado 3.1. El *ED-TOC* produce trayectorias envolventes aún ante errores de detección aislados de cualquier tipo y también ante errores concatenados del mismo tipo.
- Resultado 3.2. El *ED-TOC* produce trayectorias envolventes aún para concatenaciones en las cuales cada error de detección anticipante, siguiente a uno retardante, sea acotado.
- Resultado 3.3. El *ED-TOC* es practi-óptimo y robusto contra errores de detección anticipantes concatenados, o aislados, sean estos acotados o no.
- Resultado 3.4. El *ED-TOC* es practi-óptimo y robusto contra cualquier secuencia de errores de detección acotados, sean estos aislados o no.

Los resultados anteriores muestran las excelentes características de robustez del *ED-TOC* ante errores acotados de detección del *E-SS*, e incluso ante errores no acotados aislados. Estos mismos resultados son los que permitirán, en los capítulos siguientes, usarlo en aplicaciones en las cuales no se cumple exactamente la Condición 3.1 (pág. 73) pero en las que se dispone de una función con características similares la cual, bajo ciertas restricciones y aún cuando su uso genere errores de detección, puede utilizarse en su lugar.

El *pay-off* que se presenta entre robustez y optimalidad temporal puede analizarse usando los tiempos de acotamiento de los errores de detección *i.e.* los tiempos de travesía (T_T) y de escape (T_E). El primero es proporcional al ancho de la zona casi-óptima y el último lo es a la diferencia entre el ancho de la zona practi-óptima y el de la casi-óptima en la Figura 3.1. A su vez el ancho de la zona practi-óptima está relacionado con la cota mínima (p_{sng}) del índice de optimalidad. Por tanto, mientras más alta sea la cota mínima de optimalidad deseada menor es el margen de error de detección. Visto de otra forma, mientras mejores señales se obtengan del proceso, sin ruido y sin perturbaciones, y mientras más parecida sea γ a la especificada en la Condición 3.1 (pág. 73), menores serán los errores de detección de los eventos y más practi-óptimo podrá hacerse el *ED-TOC*.

3.4. *E-SS* práctico

El *E-SS* introducido en la Sección 3.2 es consistente con un modelo nominal en el cual los parámetros no cambian en el tiempo ni existen perturbaciones. Existe otra opción que es funcionalmente equivalente a nivel nominal y que adicionalmente ofrece ventajas para la implementación práctica. La más relevante es que permite eliminar las derivadas de las funciones detectoras de la Tabla 3.3. Esto es relevante pues las derivadas, en general, amplifican el ruido presente en la señal, limitando la robustez de la aplicación. Otra ventaja es que se reduce el horizonte de tiempo de la estimación de γ a la duración de cada segmento individual. De esa manera perturbaciones que podrían llegar a ser importantes durante una reacción completa pueden resultar despreciables en el lapso de tiempo que tarda un único segmento p.ej. un cambio de temperatura del orden de una decena de grados durante la reacción, lo cual sería algo exagerado y que tendría efectos apreciables en varios de los parámetros del reactor, se convertiría en una variación de solamente una fracción de grado durante cada segmento, y por tanto su efecto sería poco apreciable y tolerable. La idea consiste en borrar toda memoria del estimado $\underline{\gamma}^*$ en cada transición de estado, y aprovechar su forma de convergencia para saber si γ está creciendo o no, y así reemplazar las derivadas de la Tabla 3.3. La propuesta se representa en la combinación de

$$\underline{\gamma}_k^*(t) = \max_{[t_{k-1}, t]}(\underline{\gamma}) \quad \text{en} \quad t_{k-1} < t < t_k \quad (3.3)^2$$

$$\varepsilon_\gamma(R) = (\underline{\gamma} < R\underline{\gamma}_k^*) \quad (3.4)$$

para estimar prácticamente a γ^* y su tendencia, segmento a segmento (*i.e.* $\underline{\gamma}^* = \underline{\gamma}_k^*$ para el $k^{\text{ésimo}}$ segmento), y de la Tabla 3.4 para detectar los eventos que se usarán en el *ED-TOC* práctico (Figura 3.9).

² El subrayado indica valores prácticos, no nominales. Ver Nomenclatura (pág. 13)

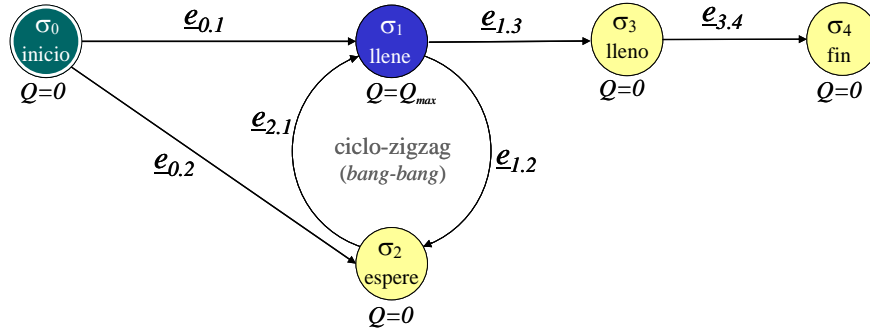


Figura 3.9. Diagrama ED-TOC: Máquina de Estados Finitos (Σ) práctica.

Tabla 3.4. E-SS: Detector de Eventos por software práctico, usando $\gamma = f(\mu_t)$

Evento	Significado	Función lógica para detección* práctica del evento
$\underline{\varepsilon}_{0.1}$	$S \leq S^*$	$\underline{\varepsilon}_{0.1} = \text{not}(\text{flag}_{\text{inhib.0}})$
$\underline{\varepsilon}_{0.2}$	$S > S^*$	$\underline{\varepsilon}_{0.2} = \text{flag}_{\text{inhib.0}}$
$\underline{\varepsilon}_{1.2}$	$S > S_{\text{alto}}$	$\underline{\varepsilon}_{1.2} = \varepsilon_\gamma(P)$
$\underline{\varepsilon}_{1.3}$	$V \geq V_f$	$\underline{\varepsilon}_{1.3} = (V \geq V_f)$
$\underline{\varepsilon}_{2.1}$	$S < S_{\text{bajo}}$	$\underline{\varepsilon}_{2.1} = \varepsilon_\gamma(P) \vee (\gamma = 0)$
$\underline{\varepsilon}_{3.4}$	$S < S_f$	$\underline{\varepsilon}_{3.4} = \varepsilon_\gamma(P_f)$

*Se detectan únicamente los eventos que dependen de S . Los que dependen de V se calculan directamente a partir de sus mediciones.
 **Aunque podría usarse la función $\varepsilon_\gamma(1)$, su robustez práctica sería marginalmente nula, como se verá más adelante.

El E-SS representado en la Figura 3.6 puede implementarse, prácticamente, mediante la programación de las funciones (ε) de la Tabla 3.4. Aunque dichas funciones ya no dependen de derivadas totales como lo hacían en la versión de la Tabla 3.3, aún así utilizan la variable γ , calculada a partir de mediciones reales, bajo el supuesto de que su comportamiento se ajusta al modelizado nominalmente (Condición 3.1, pág. 73). Pero, en la práctica, se plantean dos potenciales problemas fundamentales:

3.4.1. Propiedades del E-SS práctico ante ruido y perturbaciones en γ

Es de esperarse que exista ruido en las señales medidas, el cual, en general, puede perturbar el funcionamiento del E-SS, específicamente en la ecuación (3.4). El asunto es especialmente difícil si son ruidos impulsivos, de gran amplitud y rápidos comparados con la señal, que rebasen su acotamiento así sea durante un corto lapso

de tiempo. Pueden usarse filtros para minimizar dicho efecto indeseado, pero no podrá eliminarse completamente.

Es por tanto vital responder la siguiente pregunta de diseño: suponiendo que la señal calculada γ está perturbada con una señal de amplitud pico normalizada, *i.e.* $-1 \leq r(t) \leq 1$, acotando su efecto de la manera que se muestra en

$$\underline{\gamma} = \gamma \cdot (1 + \alpha \cdot r(t)) . \quad (3.5)$$

¿Cuál es el valor máximo del factor de incertidumbre (α) en γ para que el *ED-TOC* trabaje practi-óptimamente, si se usa un *E-SS* como el descrito en la Tabla 3.4?

De la ecuación (3.5) se obtienen las cotas para γ , *i.e.* su envolvente superior e inferior, expresadas, respectivamente, en las ecuaciones

$$\gamma^+ = \gamma \cdot (1 + \alpha) \quad (3.6)$$

$$\gamma^- = \gamma \cdot (1 - \alpha) . \quad (3.7)$$

A continuación, para responder la pregunta, se analizarán tres posibles escenarios para r . Los dos primeros suponen que, aunque su valor sea desconocido, se conoce con certeza la estructura o tendencia en el tiempo. En el último caso se supondrá que no hay estructura conocida.

Perturbación acotada no creciente en el tiempo

El primer caso se presenta cuando $dr/dt \leq 0$. Toma su peor forma cuando la disminución en r es tan grande y súbita que dicha variación por si sola puede desencadenar la detección de un evento, debido a que por un lado hace que se sobre-estime inicialmente el valor de γ^* en la ecuación (3.3) y por otro lado que después se sub-valore a γ en la ecuación (3.4). Este peor caso se puede modelizar con una $r = r_{\downarrow}$ discontinua en $t_{k-1} < t_u \leq t_k$ tal que $r_{\downarrow}(t_u^-) = 1$ y $r_{\downarrow}(t_u) = -1$. Reemplazando en el estimador de la ecuación (3.3), usando (3.6), se obtiene que $\underline{\gamma}_k^*(t_u) = \gamma^+(t_u)$ y, para la señal de entrada definida en (3.5) $\underline{\gamma}(t_u) = \gamma^-(t_u)$ *i.e.* la envolvente inferior definida en la ecuación (3.7).

Aplicando dicho peor caso a los eventos que dependen de γ en la Tabla 3.4, se obtiene, para el miembro derecho de (3.4)

$$\gamma \cdot (1 - \alpha) < R\gamma \cdot (1 + \alpha) . \quad (3.8)$$

Si el valor de R fuese tal que (3.8) siempre sea verdadero, entonces la detección de eventos no funcionaría, ya que siempre estarían activos. Para $\gamma > 0$ dicha desigualdad se puede transformar en

$$R < \frac{1 - \alpha}{1 + \alpha} \quad (3.9)$$

o, equivalentemente,

$$\alpha < \frac{1 - R}{1 + R} ;$$

condición necesaria para que el disparo del evento no se deba exclusivamente al ruido *i.e.* si R cumple la desigualdad (3.9) se puede garantizar que la detección de los eventos se da dentro de la zona casi-óptima, aunque no necesariamente en su frontera como en el caso nominal. Pero si no, los eventos pueden dispararse falsamente en todas partes.

Analizando las dos formas de la desigualdad anterior, y aplicando para $R = P$ (también para $R = P_f$) se obtienen importantes conclusiones con respecto a la robustez del *ED-TOC* contra perturbaciones de este tipo en su señal de entrada:

Resultado 3.5. El *ED-TOC*, cuando usa la Tabla 3.4 para su *E-SS*, es marginalmente robusto (Definición 2.11, pág. 60) contra incertidumbres en su señal de entrada (γ), con margen α , dado por la ecuación (3.9), cuando la señal perturbadora es no creciente en el tiempo. Dicha incertidumbre puede provenir de cualquier fuente p.ej. de ruido de medición no filtrado, o también p.ej. de cambios en β si la Condición 3.1 (invariancia, pág. 73) es violada. Si la cota de incertidumbre (α) no se respeta, no es posible garantizar el correcto funcionamiento del *ED-TOC*.

La reinterpretación del resultado anterior permite establecer un criterio de diseño para el *ED-TOC* práctico.

Criterio 3.1. Cuando el factor de incertidumbre en la señal de entrada no pueda ser rebajado mas allá de $\chi(\gamma) = \alpha$, para señales perturbadoras no crecientes, la sintonía de $P \leq (1-\alpha)/(1+\alpha)$ (ecuación (3.9)) permite al *ED-TOC*, cuando usa la Tabla 3.4 para su *E-SS*, operar de manera robusta (marginalmente). Dicha condición, sin embargo, limita el valor máximo alcanzable por el índice definido en la ecuación (2.13) a $I_\mu \leq (1-\alpha)/(1+\alpha)$. Si se elige p_{sng} menor a dicha cota, entonces el *ED-TOC* podrá sintonizarse para funcionar de manera practi-óptima, así: $p_{sng} \leq P \leq (1-\alpha)/(1+\alpha)$.

Perturbación acotada no decreciente en el tiempo

El primer caso se presenta cuando $dr/dt \geq 0$. Toma su peor forma cuando el aumento en r es tan grande y sincronizado como para hacer que, por un lado, se subestime el valor de γ^* y, por otro lado, se sobre-valore a γ , permitiendo así que el segmento se extienda *i.e.* produce un error retardante. La situación se puede modelizar con una $r = r_\uparrow$ discontinua en t_k (donde t_k es el instante en que se está por abandonar la zona en consideración *i.e.* $\mu_i(t_k) = R\mu^*$) tal que $r_\downarrow(t_k^-) = -1$ y $r_\downarrow(t_k) = 1$. Reemplazando en el estimador de la ecuación (3.3) se obtiene que $\underline{\gamma}_k^*(t_k) = \gamma^-(t_k^*)$ y, para la señal de entrada $\underline{\gamma}(t_k) = \gamma^+(t_k)$. Aplicando dicho peor caso a los eventos que dependen de γ en la Tabla 3.4, se obtiene, para el miembro derecho de (3.4)

$$\gamma \cdot (1 + \alpha) < R\gamma^* \cdot (1 - \alpha) \quad ,$$

lo que implica que la detección del evento solamente procederá cuando

$$\gamma < R \frac{(1 - \alpha)}{(1 + \alpha)} \gamma^* \quad .$$

Usando dicha ecuación en los eventos $e_{1,2}$ y $e_{2,1}$ de la Tabla 3.4 esto quiere decir que la detección se llevará a cabo por fuera de la zona casi-óptima. Sin embargo el error (retardante) será acotado si se cumple

$$p_{sng} < P \frac{(1 - \alpha)}{(1 + \alpha)}.$$

En este caso, si no existen perturbaciones de otro tipo, se puede seleccionar $P \rightarrow 1$ sin problema, y por tanto el máximo valor que puede tomar el índice de optimalidad será acotado por p_{sng} , (ecuación anterior) para ese caso

$$I_{\mu} < \frac{(1 - \alpha)}{(1 + \alpha)}.$$

Criterio 3.2. Cuando el factor de incertidumbre en la señal de entrada, para señales perturbadoras no decrecientes, no pueda ser rebajado mas allá de $\chi(\gamma) = \alpha$, incluso la sintonía de $P \rightarrow 1$ permite al *ED-TOC*, cuando usa la Tabla 3.4 para su *E-SS*, operar de manera robusta (marginalmente). Dicha condición, sin embargo, limita el ancho mínimo de la zona practi-óptima restringiendo a $p_{sng} \leq P*(1-\alpha)/(1 + \alpha)$. Entonces el *ED-TOC* podrá sintonizarse para funcionar de manera practi-óptima, así: $p_{sng} \leq P*(1-\alpha)/(1 + \alpha) \leq P < 1$.

Perturbación acotada no estructurada

Este caso es la combinación de los dos anteriores. Toma su peor forma al combinan los dos peores formas de los casos anteriores, y por tanto el criterio resultante combina el Criterio 3.1 con el Criterio 3.2, los cuales se deben satisfacer simultáneamente:

Criterio 3.3. Cuando el factor de incertidumbre en la señal de entrada no pueda ser rebajado mas allá de $\chi(\gamma) = \alpha$, se puede lograr un diseño robusto, marginalmente al acotamiento de dicha incertidumbre, del *ED-TOC* seleccio-

nando $P = (1-\alpha)/(1+\alpha)$. Si, además, $p_{sng} \leq P^*(1-\alpha)/(1+\alpha)$ entonces el controlador será también practi-óptimo.

Ya se mostró que el *ED-TOC* puede operar de manera practi-óptima y totalmente robusta en contra de incertidumbres totales en todos los parámetros del modelo y en contra incluso de una incertidumbre total en β , ecuación (3.1), siempre que esta sea constante durante cada segmento (Condición 3.1, pág. 73). Por tanto es de esperarse que, como cualquier otro controlador, se impongan ciertas condiciones mínimas a las señales medidas provenientes del proceso para poder efectuar su control. Por ejemplo filtrado contra ruidos e interferencias, cancelación de perturbaciones, etc. El Criterio 3.3 se puede expresar de una manera equivalente, quizás más útil para el diseño de dicha señal para alimentar al controlador, así:

Criterio 3.4. Si se desea controlar un biorreactor, Clase A o Clase B, con un índice de optimalidad $I_\mu \geq p_{sng}$, el máximo factor de incertidumbre tolerable en la señal de entrada al *E-SS* (γ) para que el *ED-TOC* funcione de manera practi-óptima y marginalmente robusta a dicho factor es $\chi(\gamma) = \alpha$, para un α tal que satisfaga $(1-\alpha)^2/(1+\alpha)^2 > p_{sng}$.

3.4.2. Robustificación contra retardos no modelizados y contra perturbaciones esporádicas no acotadas

El modelo simplificado del proceso usado hasta ahora no incluye los tiempos de respuesta ni de los actuadores ni de los sensores, ni tampoco los tiempos muertos de transporte durante la homogenización del influente recién añadido al tanque. Pero, aunque estos sean pequeños y aparentemente despreciables, las funciones detectoras en la Tabla 3.4 no lo consideran explícitamente así. Tampoco consideran los ruidos o perturbaciones no acotadas, así sean impulsivos *i.e.* de muy corta duración. El Resultado 3.1 muestra la tolerancia a dichas perturbaciones impulsivas cuando sean de muy esporádica aparición, *i.e.* que generen errores aislados, pero no en el caso de que sean recurrentes, *i.e.* que generen errores concatenados.

Si se acepta que la trayectoria práctica generada por el *ED-TOC* abandone la zona cuasi-óptima en la Figura 3.1, pero sin salir de la zona practi-óptima, entonces la tra-

yectoria resultante seguirá siendo practi-óptima. Por tanto es posible retardar el disparo de los eventos que detectan el cruce de la frontera casi-óptima sin causar ninguna pérdida apreciable en el desempeño del proceso (Resultado 3.4). A continuación se aprovechará dicho resultado para, agregando una función robustificadora y sin rediseñar lo ya diseñado, brindar robustez adicional al E -SS ante ruidos impulsivos no acotados y/o retardos de corta duración en la señal γ .

Nótese, del modelo del proceso en las ecuaciones (2.3) a (2.5), que las derivadas de las señales sufren cambios abruptos cuando sucede una transición *bang-bang*, pudiendo incluso cambiar de signo instantáneamente. En consecuencia los retardos producidos por los sensores, o por transporte, tienen un efecto perturbador más apreciable justo en ese instante y en los que le siguen. De cuidado especial resultan los efectos que alteren la forma de γ con respecto a la de μ , sobre todo cuando causen que sus derivadas no tengan idéntico signo, pues dicho efecto va en contra del fundamento del E -SS. Por tal razón la idea es no considerar lo que sucede en el proceso real durante un (corto) tiempo posterior a cada transición *bang-bang*.

Por otro lado, pero de manera similar, se puede exigir que un evento permanezca activo durante un lapso de tiempo posterior antes de declarar como válido su disparo. De esta manera no se ordenaría generar una transición únicamente con su transición, que podría ser un falso disparo momentáneo debido a las perturbaciones consideradas *i.e.* cortas en duración pero no acotadas.

Definición 3.14. T_s es el tiempo de estabilización de señales *i.e.* un tiempo después del cual se puede considerar que el efecto, en el proceso real, de la conmutación de un actuador ya ha sido percibido por los sensores, y T_v el máximo lapso que se acepte que un ruido o perturbación viole su cota. Por tanto el tiempo de estabilización combinado $T_{sv} = T_s + T_v$ es el mínimo lapso de tiempo luego del cual podría dispararse un evento robustificado después de ser activado su estado originador.

Criterio 3.5. Si se escoge el tiempo de estabilización combinado de modo que $0 \leq T_{sv} < T_E$ entonces la función robustificadora (ρ)

$$\rho_k(T_s, T_v, \varepsilon) = \begin{cases} 0 & \text{en } t_{k-1} \leq t < t_{k-1} + T_s \\ \int_{T_s+t_{k-1}}^t \varepsilon \cdot dt \geq T_v & \text{en } t_{k-1} + T_s \leq t \leq t_k \end{cases} \quad (3.10)$$

permitirá, explícitamente, evitar tanto los errores de detección en el E -SS debidos a efectos de retardo no modelizados (menores a T_s) como los debidos a ruidos impulsivos no acotados pero de corta duración (menor a T_v).

Nótese que la función robustificadora (ρ_k) en la ecuación (3.10) se disparará únicamente luego que ε haya estado activada por al menos un lapso T_v de tiempo, no necesariamente consecutivo, durante el $k^{\text{ésimo}}$ segmento, después de un tiempo (T_s) en que los retardos en las señales, debidos a la conmutación de los actuadores y/o dinámica de los sensores, hayan perdido efecto. La Tabla 3.5 muestra cómo implementar el E -SS de la Tabla 3.4 usando dicha función robustificadora.

Tabla 3.5. E -SS incluyendo verificación de redundancia temporal

Evento	Significado	Función lógica robustificada* para detección del evento
$\underline{\varepsilon}_{0.1}$	$S \leq S^*$	$\underline{\varepsilon}_{0.1}$
$\underline{\varepsilon}_{0.2}$	$S > S^*$	$\underline{\varepsilon}_{0.2}$
$\underline{\varepsilon}_{1.2}$	$S > S_{\text{alto}}$	$\rho_k(T_s, T_v, \underline{\varepsilon}_{1.2})^{**}$
$\underline{\varepsilon}_{1.3}$	$V \geq V_f$	$\underline{\varepsilon}_{1.3}^{***}$
$\underline{\varepsilon}_{2.1}$	$S < S_{\text{bajo}}$	$\rho_k(T_s, T_v, \underline{\varepsilon}_{2.1})$
$\underline{\varepsilon}_{3.4}$	$S < S_f$	$\rho_k(T_s, T_v, \underline{\varepsilon}_{3.4})$

* Si se elige $T_v = T_s = 0$ entonces no hay verificación de redundancia temporal *i.e.* $\rho_k(0, 0, \underline{\varepsilon}) = \underline{\varepsilon}$

** T_s es el tiempo de holgura para estabilización de señales después de una conmutación de Q , y T_v es el máximo tiempo permitido de violación de cota de una incertidumbre.

*** También podría usarse $\rho_k(0, T_v, \underline{\varepsilon}_{1.3})$ para añadir robustez a la detección del volumen máximo si el Supuesto 2.5 no se cumpliera.

3.4.3. Protección anti-*chattering*

En la sub-sección anterior se consideró un método para evitar que los retardos no modelizados del proceso afecten el funcionamiento del ED -TOC. El retardo en un actuador práctico existe básicamente porque no es posible conmutar de manera disconti-

nua, *i.e.* en un lapso de tiempo nulo, tal como el modelo nominal simplificado supone. De hecho, un retardo mínimo entre actuaciones es una característica deseable de incluir en el diseño de un control práctico, como una manera de proteger la integridad del actuador ante el caso de solicitarle rápidas conmutaciones sucesivas (*chattering*), de modo que no pueda ser conmutado a una frecuencia superior a la que sus características físicas permiten. Sea T_c el tiempo mínimo recomendado entre conmutaciones del actuador *i.e.* el que tarda en estar listo para una nueva conmutación operando normalmente y de manera consecutiva. Entonces dicha conmutación podría ser modelizada con una función continua, que tarda un cierto tiempo (inferior a T_c) en cruzar desde uno de sus límites hasta el opuesto. La forma de la función de conmutación en realidad no es relevante para el *E-SS*. Lo importante es que si una nueva transición se exige antes de terminada la primera, el efecto resultante podría no ser el deseado por el controlador y, adicionalmente, el actuador puede sufrir desgaste prematuro por someterlo a condiciones de uso por fuera de su rango de diseño. Por tanto, una ventaja adicional de agregar la función robustificadora a los eventos susceptibles de ocasionar transiciones *bang-bang*, en la Tabla 3.4, es que permiten acotar la máxima frecuencia de conmutación demandada al actuador *i.e.* $T_{sv} \geq T_c$.

El tiempo de estabilización de señales (T_s) permite también eliminar la necesidad de suponer entradas (Q) discontinuas, lo cual, formalmente, podría ser una fuente de problemas, especialmente si el sistema nominal pudiese entrar en un ciclo tal que permitiese la conmutación a frecuencia infinita. Al establecer un tiempo mínimo entre conmutaciones, donde lo que sucede en dicho tiempo no es considerado para el funcionamiento del *E-SS*, se puede modelizar a $Q(t)$ como una señal continua (lo cual en realidad es): continua y creciente en la transición *OFF/ON*, y continua y decreciente en la *ON/OFF*, sin importar su forma exacta durante dichas transiciones. Nota: dicho modelizado no se realizará pues, tal como se explicó, no es necesario considerarlo de manera explícita. Lo que sí es necesario es comprender que establecer una frecuencia máxima de conmutación impone un límite mínimo al ancho de la zona practi-óptima y, por tanto, también al índice de optimalidad.

Criterio 3.6. Si se asigna $T_{sv} > T_c$ entonces la función robustificadora (ρ) de la ecuación (3.10) permitirá, explícitamente, evitar un efecto *chattering* dañino

para el actuador. Pero para conservar la practi-optimalidad es necesario, al igual que en el Criterio 3.5, que $T_{sv} < T_E$. Por tanto deben procurarse condiciones de diseño tales que $T_c < T_{sv} < T_E$.

3.5. Metodología de diseño del *E-SS* práctico para el *ED-TOC*

Para lograr un *ED-TOC* practi-óptimo, utilizando el *E-SS* práctico, basta aplicar los criterios obtenidos en las sub-secciones anteriores. El proceso general de diseño sugerido puede resumirse en los siguientes pasos:

- 1) De acuerdo a la condición estándar del diseño biológico del proceso, y considerando sus márgenes de incertidumbre, seleccionar el rango de Q_{max} que garantiza la satisfacción de la Condición 2.8 (mejorabilidad, pág. 50). De esa familia se recomienda escoger el mínimo valor posible para Q_{max} . En primera instancia porque así se requiere un actuador más pequeño, por tanto menos costoso y más fácil de instalar y mantener y, en segunda instancia, porque entonces los efectos indeseados y no modelizados de las transiciones *bang-bang* serán menores.
- 2) Encontrar una función apropiada para fungir como γ en la Condición 3.1 (pág. 73) y que pueda medirse directamente, o estimarse en línea utilizando únicamente las mediciones y parámetros del modelo disponibles, generando así un γ práctico.
- 3) Considerar las desviaciones esperadas del γ práctico con respecto al γ nominal. Pueden presentarse diversos casos particulares según la información disponible y el tipo de reactor. El caso de reactores aerobios degradadores de sustrato se estudiará en el Capítulo 4, y en el Capítulo 5 el de los anaerobios productores de biomasa.
- 4) Caracterizar las perturbaciones y ruido que sufre el γ práctico y, usando el Criterio 3.3 (pág. 88) o el Criterio 3.4 según convenga, establecer el máximo valor de la cota mínima del índice de optimalidad (p_{sng}) y definir las superficies nominales de conmutación seleccionando a P .

- 5) Caracterizar el retardo, producido durante las conmutaciones *bang-bang*, susceptible de deformar provisionalmente a γ con respecto a γ , y seleccionar un margen de tiempo suficiente (T_s) para la estabilización de dicha señal.
- 6) Caracterizar el tiempo de robustificación necesario (T_v) ante ruidos impulsivos no acotados y eventuales.
- 7) Verificar que se satisface el Criterio 3.5 de robustificación (pág. 90). En caso negativo iterar al paso 4.
- 8) Verificar que se satisface el Criterio 3.6 de conmutación (pág. 92) para evitar que el actuador pueda sufrir por efecto *chattering*. En caso negativo iterar al paso 5.

4. CONTROL DEL LOTE-ALIMENTADO PARA PROCESOS DEGRADADORES DE SUSTRATO

En este capítulo se explicará la forma de implementar prácticamente el *ED-TOC* para aplicarlo a los biorreactores degradadores de sustrato. Se analizará su desempeño en términos de optimalidad temporal y de robustez, y se evaluará el cumplimiento de los siete retos planteados en la introducción.

4.1. Control de procesos degradadores de sustrato

Para que un proceso biotecnológico como los estudiados aquí sea viable y no necesite re-inoculaciones cotidianas para agregarle nueva biomasa desde el exterior, es necesario que la biomasa (B) se reproduzca durante cada reacción para así aumentar su cantidad. En algunos procesos dicho crecimiento es diseñado intencionalmente pequeño para cada tanda individual estándar. Esto sucede cuando se combinan algunas de las siguientes condiciones: se utiliza una relación sustrato/biomasa baja; el volumen de intercambio ($V_f - V_0$) es pequeño comparado con el volumen final (V_f); la tasa de crecimiento específico de la biomasa es baja; el tiempo medio de retención de sólidos es elevado; y/o la constante estequiométrica de conversión sustrato a biomasa es baja. Por tanto el diseño de la condición estándar del bio-proceso es clave para determinar si hay, o no, generación de biomasa en cantidades apreciables o, en otras palabras, si la biomasa total al final (B_f) de la reacción es similar a la del inicio (B_0).

Es importante clarificar que, para el modelo nominal, dicha situación de generación de nueva biomasa no depende de la forma de controlar dicho proceso. Podría pensarse que si se utiliza un control óptimo, de tiempo mínimo, entonces se generará mayor cantidad de biomasa. En un proceso tipo PTAR dicho resultado sería contraproducente en el largo plazo pues un excedente de biomasa no es deseable. Pero no. La cantidad de biomasa producida por unidad de sustrato tratado será la misma pues depende de una relación estequiométrica. Por esta misma razón es cierto que si el sustrato se trata en menor tiempo, entonces se va a producir también la misma cantidad de biomasa por tanda, aunque en ese mismo menor tiempo. Sin embargo la cantidad de biomasa total producida, para una misma masa total de sustrato tratado, será la misma.

Definición 4.1. $B_m = (B_f + B_0)/2$ es la biomasa total media y $B_d = (B_f - B_0)/2$ la diferencia media, donde $B_0 = X_0V_0$ es la biomasa total inicial y $B_f = X_fV_f$ es la final, con $B_f > B_0$. Entonces la biomasa total puede expresarse en la forma de la ecuación (3.5) como $B(t) = B_m[1 + \alpha_B r_B(t)]$, con r_B cumpliendo el Criterio 3.2 (pág. 88), donde $\alpha_B = B_d / B_m$. Nótese que si r_B fuese desconocida, α_B sería el factor simétrico de incertidumbre en B .

Para efectos de esta tesis se dirá que el **proceso** es (principalmente) **degradador de sustrato** si $0 \leq \alpha_B \ll 1$ i.e. $B_f \approx B_0$.

Para el *ED-TOC* la importancia de la definición anterior radica en que, como se verá en las Secciones 4.2 y 4.3, usando las mediciones disponibles es posible calcular una función que tiene la forma de la ecuación

$$\gamma = \beta\mu_t \cdot (1 + \alpha_B r_B) \quad , \quad (4.1)$$

donde r_B es una perturbación que depende del crecimiento relativo de la biomasa, acotada por α_B . Puesto que dicho crecimiento es pequeño entonces la perturbación generada es pequeña y dicha función puede usarse directamente para alimentar el *E-SS* y obtener un *ED-TOC* practi-óptimo.

En las siguientes secciones se estudiará la manera práctica de obtener el equivalente a la ecuación (4.1) para alimentar al *E-SS*, en cada clase de biorreactor.

4.2. Control de biorreactores Clase A (anaerobios) degradadores de sustrato

4.2.1. Completando el Reto 3: Cálculo de la entrada al *E-SS*

Recordando el modelo de los reactores Clase A (pág. 43) se aprecia que si sus salidas medibles ($\mathbf{y}^T = [y_{PG}, V]$) se multiplican entre si, como en la ecuación

$$\gamma = y_{PG} \cdot V \quad , \quad (4.2)$$

se obtiene un resultado (γ) de forma similar, pero no igual, al especificado nominalmente para el *E-SS*. Ese resultado proviene de un cálculo efectuado con las mediciones dis-

ponibles y tiene, por tanto, incertidumbre. Dicha incertidumbre puede acotarse y de allí establecer los criterios adecuados de diseño para este caso.

4.2.2. Criterios de diseño del *E-SS* y del *ED-TOC*

Recordando que $B=XV$ y reemplazando la ecuación (2.7) en la (4.2) se obtiene

$$\underline{\chi} = k_{PG} \mu_t B \quad , \quad (4.3)$$

que, usando la Definición 4.1, se transforma en

$$\underline{\chi} = k_{PG} \mu_t B_m \cdot (1 + \alpha_B r_B) \quad , \quad (4.4)$$

y reemplazando de (3.1) se obtiene

$$\underline{\chi} = \beta \mu_t \cdot (1 + \alpha_B r_B)$$

$$\underline{\chi} = \gamma \cdot (1 + \alpha_B r_B) \quad ,$$

donde $\beta = k_{PG} B_m$ es una constante desconocida que se ajusta a la Condición 3.1 (pág. 73) y r_B es una función que explica el crecimiento acotado y monotónico de la biomasa.

Por tanto, aplicando el Criterio 3.2 (pag. 88), se tiene que

Criterio 4.1. Para un reactor Clase A degradador de sustrato (Definición 4.1, pág. 96) puede usarse el *ED-TOC*, con la Tabla 3.4 para su *E-SS*, y lograr una operación practi-óptima y robusta (marginalmente), cuando no existen otras incertidumbres diferentes al crecimiento de la biomasa, si es posible seleccionar al menos un P tal que $p_{sng} \leq P^*(1-\alpha_B)/(1+\alpha_B)$.

Ahora, para la selección de P debe considerarse también la incertidumbre generada por el sensor del producto gaseoso (PG), *i.e.* $\chi(\underline{y}_{PG}) = \alpha_{PG}$, la cual es, en general, de estructura desconocida. Por tanto, utilizando el Criterio 3.3 (pág. 88), se obtiene

Criterio 4.2. Dado un factor de incertidumbre ($\chi(\underline{y}_{PG}) = \alpha_{PG}$) en la medida del producto gaseoso en un reactor Clase A degradador de sustrato (Definición 4.1)

dicha incertidumbre entra de forma multiplicativa en la señal γ en (4.2).

Por tanto debe extenderse el Criterio 4.1, usando el Criterio 3.3, de la siguiente manera: Seleccionar $P \leq (1-\alpha_{PG})/(1+\alpha_{PG})$ y respetar que $p_{sng} \leq P[(1-\alpha_B)(1-\alpha_{PG})]/[(1+\alpha_{PG})(1+\alpha_B)]$.

El Criterio 4.2 resume lo indispensable para controlar este tipo de reactores, de manera practi-óptima, siempre que el proceso sea mejorable.

4.3. Control de biorreactores Clase B (aerobios) degradadores de sustrato

Esta subclase es de interés especial pues a ella pertenece la aplicación que permite remover del AR industrial, por medio de la mineralización, los tóxicos orgánicos contenidos en ella. Por tanto los resultados de esta sección serán los que se apliquen, en el Capítulo 6, al problema práctico motivador de este estudio. Comparado con el caso anterior aquí se presenta un problema adicional de incertidumbre, el cual, como se mostrará, puede ser resuelto de dos maneras. Pero, antes de abordar las dos posibles soluciones, se estudiará el asunto de la aeración y se definirá un término para explicar el consumo de oxígeno, cuyo cálculo será útil para alimentar al *E-SS*.

4.3.1. Aeración

Para los microorganismos aerobios es vital la presencia de oxígeno en el medio en el cual se encuentren, pues lo utilizan tanto para su metabolismo interno como para procesar el sustrato que hallen en ese mismo medio. En ese sentido el oxígeno puede considerarse como un reactivo limitante (Dochain y Vanrollegheem, 2001). Una forma de suministrar ese oxígeno es mediante la aeración *i.e.* uso de sopladores y difusores para inyectar, en el medio líquido, burbujas finas de aire a presión. Antes de que las burbujas escapen a la atmósfera, parte del oxígeno que contienen se transfiere al medio líquido, disolviéndose en él. Si no es consumido, su grado de disolución aumentará hasta saturarse (O_{sat}). Pero si es consumido se presentará una dinámica del balance aporte/gasto, modelizada por la ecuación (2.6). Gracias a que el *DO* es fácilmente medible, entonces es posible seguir dicha dinámica y, si el aporte de oxígeno es conocido, entonces es viable estimar el gasto. Dado que ese gasto está relacionado con la velocidad

a la que la reacción del sustrato se está llevando a cabo por parte de la biomasa, entonces es posible utilizar dicho estimado a modo de γ para alimentar el E -SS.

4.3.2. Tasa Másica de Consumo de Oxígeno ($OMUR$)

La dinámica del oxígeno en la ecuación (2.6) puede ser interpretada con la siguiente ecuación (Dochain y Vanrolleghem, 2001)

$$\frac{dO}{dt} = OTR - OUR + D \cdot (O_i - O) ,$$

donde $D = Q/V$ es el término de dilución; OTR (del inglés *Oxygen Transfer Rate*) es la tasa de transferencia de oxígeno; $OUR = OUR_{ex} + OUR_{end}$ (del inglés *Oxygen Uptake Rate*) es la tasa de consumo de oxígeno, el exógeno (OUR_{ex}) como reactivo para procesar el sustrato y el endógeno (OUR_{end}) para el auto-metabolismo; O es el oxígeno disuelto en el medio líquido del tanque y O_i en el influente.

Los términos que representan al OUR y sus componentes vienen dados por

$$OUR := (k_2 \mu_t + b)X$$

$$OUR_{ex} := k_2 \mu_t X; \quad OUR_{end} := bX$$

con una equivalencia proveniente de organizar la ecuación (2.6), así

$$OUR = k_L a (O_{sat} - O) - (O - O_i) \frac{Q}{V} - \frac{dO}{dt} .$$

Si cada una de las ecuaciones anteriores se multiplica por el volumen (V), y recordando que $B = XV$, se convierten en la denominada **tasa másica de consumo de oxígeno** ($OMUR$ del inglés *Oxygen Mass Uptake Rate*):

$$OMUR = (k_2 \mu_t + b)B \quad (4.5)$$

$$OMUR_{ex} = k_2 \mu_t B; \quad OMUR_{end} = bB$$

$$OMUR = k_L a (O_{sat} - O)V - (O - O_i)Q - V \frac{dO}{dt} . \quad (4.6)$$

La ecuación (4.5) es muy parecida a la utilizada en el caso de reactores anaerobios (Sección 4.2, pág. 96) para alimentar al E -SS. La única diferencia es el término perturbador aditivo (b) relacionado con la respiración endógena. Lo importante de la pareja es que la ecuación (4.6) es computable en línea, pues todos los términos son o medibles o conocibles con certeza. Justamente, p.ej., $k_L a$, O_i y O_{sat} están entre los más ciertos de los parámetros del modelo de la reacción, pues no están relacionados con fenómenos biológicos, que presentan alta variabilidad, sino con fenómenos físicos.

Supuesto 4.1. Para un proceso biológico aerobio, durante la máxima actividad de la reacción del sustrato, el consumo de oxígeno por actividad exógena es mucho mayor que por actividad endógena *i.e.* $OMUR_{ex} \gg OMUR_{end}$. Esto es equivalente, en la ecuación (4.5), a decir que $k_2 \mu^* \gg b$.

Nótese que si la ecuación (4.5) tuviese la forma exacta de la ecuación (4.3) entonces el problema ya estaría resuelto. Pero se diferencian en una traslación (b) del término acompañante de B . La Figura 4.1 ilustra dicha transformación (ζ) de manera genérica (para este caso particular $c := b$).

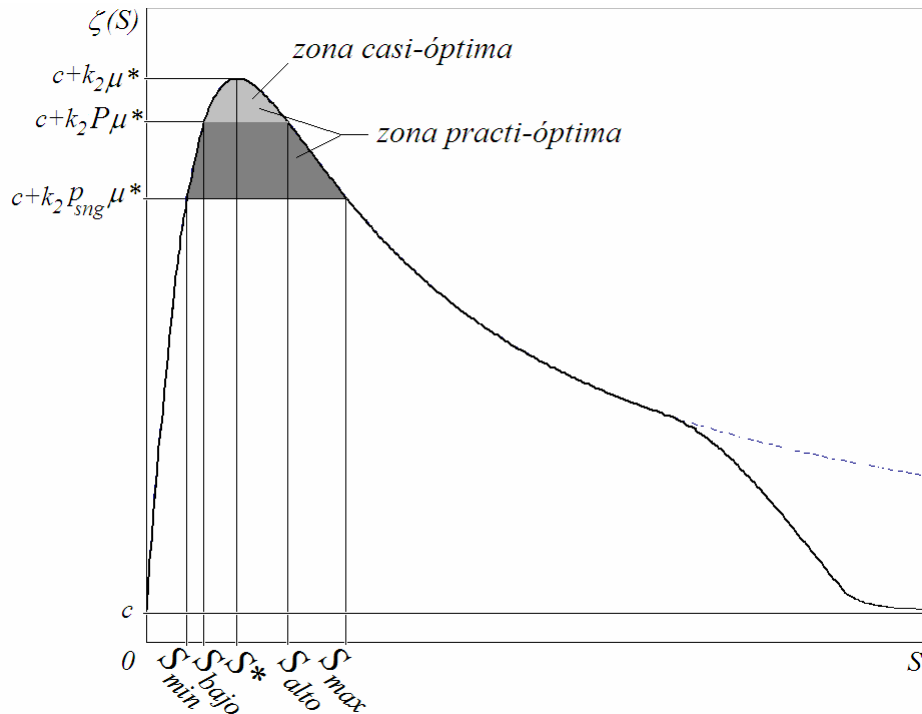


Figura 4.1. Transformación para μ en el caso aerobio

La forma de tratar la perturbación descrita genera dos tipos de soluciones, las cuales se analizarán en las dos sub-secciones siguientes.

4.3.3. Considerar b como una perturbación de estructura desconocida

Se presentan en esta sub-sección dos alternativas. Cada una se denotará con un número para futura referencia. Sin embargo, por ser también puntos de división naturales de las ideas del texto, se constituyen igualmente en subtítulos no numerados de la sub-sección:

Alternativa 4.1. Biomasa inicial desconocida y $S_0 > 0$

En una primera versión de solución al problema del término perturbador (b) en la ecuación (4.5) se usó la ecuación

$$\gamma = (k_2\mu_t + b)B \quad (4.7)$$

para alimentar al $E-SS$ (i.e. $\gamma = OMUR$) bajo el Supuesto 4.1. Esto es que la variable nominal es $\gamma = OMUR_{ex}$ pero que la variable práctica disponible, la cual incluye una perturbación aditiva, está dada por $\gamma = OMUR_{ex} + OMUR_{end}$ computable de la ecuación (4.6). Puesto que precisamente la tarea del $ED-TOC$ es mantener a μ_t cerca de μ^* durante toda la aproximación del arco singular, entonces el término perturbador es relativamente pequeño, y acotado, durante la misma. Un problema aparece cuando μ_t disminuye, que es el caso al final de la reacción. Allí el supuesto de que μ_t está cerca de μ^* no es necesariamente válido. Incluso podría suceder que $k_2\mu_t(t_f) < b$, imposibilitando por tanto una correcta detección del evento final ($e_{3.4}$) en su forma original. Este inconveniente puede solucionarse reemplazando la función detectora de dicho evento por otra equivalente. Una opción es usar el mismo algoritmo que utiliza la estrategia VTC para detectar el final de reacción. La idea de dicho algoritmo consiste en esperar a que el DO se establezca en un valor cerca de la saturación, en su punto de equilibrio, definido en la ecuación (2.10).

Para la aproximación del arco singular la incertidumbre causada por b en la ecuación (4.7) sería independiente de B y tendría el mínimo valor, en la superficie singular, de $b/(k_2\mu^*)$, el cual es pequeño dado el Supuesto 4.1. El mayor valor de la incertidumbre

aparecería para el menor valor experimentado de μ_t . Por tanto es necesario restringir el rango de la solución, mediante el

Criterio 4.3. Por diseño se asume que nunca se trabajará por debajo del límite $\mu_t = \mu^*/2$ durante la aproximación del arco singular *i.e.* $I_\mu \geq 0.5$

Dicha incertidumbre se tomaría, en el peor caso, como un factor producido por una perturbación de estructura desconocida y que afecta a $\gamma = k_2 \mu_t B$, y tendría un factor de incertidumbre (α_b), acorde al Criterio 4.3, definido como

$$\alpha_b := \chi(k_2 \mu_t) = \frac{2b^+}{k_2^- \mu^{*-}} . \quad (4.8)^3$$

Reescribiendo la ecuación (4.7) usando este resultado se obtiene

$$\underline{\gamma} = k_2 \mu_t B \cdot (1 + \alpha_b r_b)$$

donde $r_b(t)$ es una perturbación acotada y cuya estructura se supone desconocida. Ahora, aplicando la misma representación de la biomasa total dada por la Definición 4.1 (pág. 96) se obtiene que

$$\underline{\gamma} = k_2 B_m \mu_t \cdot (1 + \alpha_b r_b)(1 + \alpha_B r_B).$$

Eligiendo $\alpha_{bB} = \alpha_b + \alpha_B + \alpha_b \alpha_B$ y $r_{bB} = (\alpha_b r_b + \alpha_B r_B + \alpha_b \alpha_B r_b r_B) / \alpha_{bB}$ se obtiene

$$\underline{\gamma} = k_2 B_m \mu_t \cdot (1 + \alpha_{bB} r_{bB}) ,$$

la cual tiene misma forma de la ecuación (4.4) y por tanto es posible usarla aprovechando los mismos resultados, así:

$$\underline{\gamma} = \beta \mu_t \cdot (1 + \alpha_{bB} r_{bB})$$

$$\underline{\gamma} = \gamma \cdot (1 + \alpha_{bB} r_{bB}) ,$$

³ Recordar que λ^- y λ^+ indican las cotas, inferior y superior, tanto del valor nominal de λ como de su valor práctico $\underline{\lambda}$ (Definición 2.7).

donde $\beta = k_2 B_m$ es una constante desconocida que se ajusta a la Condición 3.1 (pág. 73) y r_{bB} es una función que explica el crecimiento acotado y monotónico de la biomasa simultáneamente con la incertidumbre causada por la respiración endógena.

Por tanto, aplicando el Criterio 3.2 (pág. 88) se tiene que

Criterio 4.4. Para un reactor Clase B tipo degradador de sustrato (Definición 4.1, pág. 96) puede usarse el *ED-TOC*, implementando el *E-SS* con la Tabla 3.4, y lograr una operación practi-óptima y robusta (marginalmente), cuando no existen otras incertidumbres diferentes al crecimiento de la biomasa y la respiración endógena, si es posible seleccionar al menos un P tal que $p_{sng} \leq P \cdot (1 - \alpha_{bB}) / (1 + \alpha_{bB})$.

Ahora, para la selección de P debe considerarse también la incertidumbre generada por el sensor de *DO* y por los parámetros involucrados en el cálculo del *OMUR*, *i.e.* $\chi(OMUR) = \alpha_{OMUR}$, la cual es, en general, de estructura desconocida. Por tanto, utilizando el Criterio 3.3 (pág. 88), se obtiene

Criterio 4.5. Dado un factor de incertidumbre ($\chi(OMUR) = \alpha_{OMUR}$) en el cálculo del *OMUR* en la ecuación (4.6), a partir de la medida del *DO* y de V , en un reactor Clase B, del tipo degradador de sustrato (Definición 4.1, pág. 96), entonces dicha incertidumbre entra de forma multiplicativa en la señal γ . Por tanto debe extenderse el Criterio 4.4, usando el Criterio 3.3, de la siguiente manera: Seleccionar $P \leq (1 - \alpha_{OMUR}) / (1 + \alpha_{OMUR})$ y respetar que $p_{sng} \leq P \cdot [(1 - \alpha_{bB})(1 - \alpha_{OMUR})] / [(1 + \alpha_{OMUR})(1 + \alpha_{bB})]$.

El Criterio 4.5 resume lo indispensable para controlar este tipo de reactores, de manera óptima, siempre que su proceso sea mejorable.

Alternativa 4.2. Biomasa inicial conocida o $S_0 = 0$

La solución anterior trabaja perfectamente y fue la utilizada en la primera versión del *ED-TOC* práctico aplicado en el problema reportado en el Capítulo 6. Sin embargo,

durante la realización de los experimentos en el laboratorio, se descubrió la posibilidad de reducir sustancialmente la incertidumbre generada por la respiración endógena, aprovechando el caso cuando se sabe que $S_0 \approx 0$.

En general existe un tiempo muerto entre una tanda y la siguiente. Para evitar que al inicio del llenado el proceso estuviese en condiciones limitantes de DO se decidió aprovechar los últimos minutos de dicho tiempo muerto para pre-aerar el tanque, garantizando así que al iniciar la reacción el nivel de DO fuese suficiente ($O > O_{min}$). Ante la ausencia de sustrato ($S_0 \approx 0$), el $OMUR$ se estabilizaba rápidamente, aún si el DO no lo hacía hasta un tiempo después. En esta alternativa se explicará cómo utilizar dicha medida inicial del $OMUR$ para reducir sustancialmente la incertidumbre causada por b en la ecuación (4.5).

Si $S_0 = 0$ entonces $\mu_{t,0} = 0$. Reemplazando en la ecuación (4.5) se obtiene

$$OMUR_0 = OMUR_{end,0} \quad \text{pues} \quad OMUR_{ex,0} = 0; \quad OMUR_{end,0} = bB_0.$$

La medición del $OMUR_0$ está disponible justo al final de la pre-aeración, así que es posible utilizarla como una medida del $OMUR_{end,0}$ actualizada, y confiable, en cada nueva tanda de reacción. Nótese que también podría calcularse si se tuviesen, por separado, datos confiables para B_0 y para b . Por tanto, reescribiendo la ecuación (4.5) y restando dicha medida se obtiene

$$\begin{aligned} (k_2\mu_t + b)B - OMUR_{end,0} &= OMUR - OMUR_{end,0} \\ (k_2\mu_t + b)B - bB_0 &= OMUR - OMUR_{end,0} \\ \left(k_2\mu_t + b \frac{B - B_0}{B} \right) B &= OMUR - OMUR_{end,0}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Sea c la transformación de la Figura 4.1 definida por

$$c = b \frac{B - B_0}{B}, \quad (4.10)$$

la cual está acotada por

$$c^- = 0 \quad ; \quad c^+ = c_f^+ \quad (4.11)$$

donde c_f es el valor de c para $t = t_f$, de modo que

$$c_f^- = b^- \frac{B_f^- - B_0^-}{B_f^+} \quad (4.12)$$

$$c_f^+ = b^+ \frac{B_f^+ - B_0^-}{B_f^-} .$$

Reemplazando la ecuación (4.10) en la (4.9) se obtiene

$$(k_2\mu_t + c)B = OMUR - OMUR_{end.0}. \quad (4.13)$$

Nótese que el miembro derecho de (4.9) es computable en línea y que, en el miembro izquierdo, el término perturbador (b) está ahora multiplicado por un factor que reduce su incertidumbre con lo cual, en la ecuación (4.13), se convierte en c . Dado que en un proceso degradador de sustrato se tiene que $0 \leq (B - B_0)/B \ll 1$ (Definición 4.1, pág. 96) la reducción de incertidumbre puede alcanzar a ser de varios órdenes de magnitud. Por tanto si se usa por γ el miembro derecho de la ecuación (4.13) y si, en la ecuación (4.8), se reemplaza b^+ por el c^+ de la ecuación (4.11) todos los resultados de la Alternativa 4.1 son directamente utilizables, con la ventaja de que el factor de incertidumbre en la ecuación (4.8) será mucho menos restrictivo.

4.3.4. Considerar b como una perturbación de estructura conocida

En la sub-sección anterior se desaprovecha el conocimiento de la transformación definida en la ecuación

$$\zeta = c + k_2\mu \quad , \quad (4.14)$$

representada en la Figura 4.1. Por tanto, a continuación, se propondrán otras alternativas diferentes que aprovechan el conocimiento parcial que exista acerca de esta transformación.

Una ventaja de esta alternativa es que permite restaurar la detección del final de reacción de una manera similar a la nominal. La idea consiste en utilizar la Tabla 4.1 en vez de la Tabla 3.4 para el E -SS.

Tabla 4.1. E -SS: Detector de Eventos por *software* práctico, usando $\gamma = f(\zeta)$

Evento	Significado	Función lógica para detección práctica del evento
$\underline{\epsilon}_{0.1}$	$S \leq S^*$	$\underline{\epsilon}_{0.1} = \text{not}(\text{flag}_{\text{inhib.0}})$
$\underline{\epsilon}_{0.2}$	$S > S^*$	$\underline{\epsilon}_{0.2} = \text{flag}_{\text{inhib.0}}$
$\underline{\epsilon}_{1.2}$	$S > S_{\text{alto}}$	$\underline{\epsilon}_{1.2} = \epsilon_{\gamma}(P^+)$
$\underline{\epsilon}_{1.3}$	$V \geq V_f$	$\underline{\epsilon}_{1.2} = (V \geq V_f)$
$\underline{\epsilon}_{2.1}$	$S < S_{\text{bajo}}$	$\underline{\epsilon}_{2.1} = \epsilon_{\gamma}(P^+)$
$\underline{\epsilon}_{3.4}$	$S < S_f$	$\underline{\epsilon}_{3.4} = \epsilon_{\gamma}(P_f^-)$

Sea una entrada al E -SS de la Tabla 4.1 con la forma de la ecuación

$$\gamma = \zeta B . \quad (4.15)$$

Usando la ecuación (4.14) se pueden definir las siguientes relaciones:

$$\zeta^* := c + k_2 \mu^* \quad (4.16)$$

$$P_{\zeta} \zeta^* := c + k_2 P \mu^* \quad (4.17)$$

$$p_{\text{sng.}\zeta} \zeta^* := c + k_2 p_{\text{sng}} \mu^* \quad (4.18)$$

$$p_{f,\zeta} \zeta^* := c + k_2 p_f \mu^* . \quad (4.19)$$

La idea de la transformación es como sigue. Si se desea que un evento suceda, p.ej. en la ecuación (4.17), cuando $\mu = P \mu^*$ entonces basta sintonizar el E -SS para que dicho evento suceda cuando $\zeta = P_{\zeta} \zeta^*$. Por tanto, de las ecuaciones (4.16)-(4.19), es posible establecer las equivalencias nominales para las relaciones siguientes:

$$P_{\zeta} = \frac{c + k_2 P \mu^*}{c + k_2 \mu^*} \quad (4.20)$$

$$p_{sng.\zeta} = \frac{c + k_2 p_{sng} \mu^*}{c + k_2 \mu^*} \quad (4.21)$$

$$p_{f.\zeta} = \frac{c + k_2 p_f \mu^*}{c + k_2 \mu^*} \quad (4.22)$$

Nótese que si $c = 0$ entonces la transformación de las relaciones anteriores es la identidad. Similarmente si $c \ll k_2 \mu^*$ entonces $P_{\zeta} \approx P$; $p_{sng.\zeta} \approx p_{sng}$; $p_{f.\zeta} \approx p_f$.

También es claro que en esa situación las incertidumbres en k_2 y μ son poco perceptibles comparadas con la incertidumbre en c . De todas formas, para evitar inconvenientes en la transformación, se pueden escoger los umbrales de la Tabla 4.1, de modo que se garantice que las regiones casi-óptima y practi-óptima obtenidas, luego de la transformación, estén contenidas en las originales, usando las ecuaciones (4.20)-(4.22) así:

$$P^+ = P_{\zeta}^+ \quad ; \quad P_{\zeta}^+ = \frac{c_f^+ + P k_2^- \mu^{*-}}{c_f^+ + k_2^- \mu^{*-}}$$

$$p_{sng.\zeta}^+ = \frac{c_f^+ + p_{sng} k_2^- \mu^{*-}}{c_f^+ + k_2^- \mu^{*-}}$$

$$P_f^- = p_{f.\zeta}^- \quad ; \quad p_{f.\zeta}^- = \frac{c_f^- + p_f k_2^+ \mu^{*+}}{c_f^- + k_2^+ \mu^{*+}} \quad .$$

Alternativa 4.3. Biomasa inicial desconocida y $S_0 > 0$

En este caso se utiliza la misma entrada al E -SS que en la Alternativa 4.1 *i.e.* la ecuación (4.6).

Se usan las ecuaciones (4.20) y (4.22), para alimentar la Tabla 4.1 e implementar con ella el E -SS, donde $c = b$; $c_f^- = b^-$; $c_f^+ = b^+$.

Alternativa 4.4. Biomasa inicial conocida o $S_0 = 0$

En este caso se utiliza la misma entrada al E - SS que en la Alternativa 4.2. *i.e.* la ecuación (4.13).

Se usan las ecuaciones (4.20) y (4.22), para alimentar la Tabla 4.1 e implementar con ella el E - SS , con las ecuaciones (4.12) y (4.11).

4.4. Evaluación de los siete retos: caso degradador de sustrato

En la sub-sección 3.2.3 (pág. 78) se evaluó cómo, al usar el ED - TOC , todos los retos planteados en la Introducción (pág. 20), excepto uno, se cumplían totalmente. Para el Reto 3, el faltante, necesitaba explicarse cómo usar las mediciones disponibles para calcular γ . Justamente eso es lo que se acaba de hacer en la sub-sección 4.2.2 para los reactores Clase A degradadores de sustrato, y por tanto dicho reto se cumple a cabalidad para ese caso. Se puede obtener una operación practi-óptima, totalmente robusta contra incertidumbre en todos sus parámetros, si se satisface el Criterio 4.2 (pág. 97).

En el caso de los reactores Clase B degradadores de sustrato se estudiaron diferentes alternativas para enfrentar un problema adicional causado por una perturbación debida a la respiración endógena. En la Alternativa 4.1 se resuelve el problema de una manera que impide detectar el final de reacción (*i.e.* Reto 2) de la misma manera que para el caso Clase A. Sin embargo se ofrece una alternativa para resolver dicho reto, usando un algoritmo previamente desarrollado para la modalidad de control VTC , y por tanto todos los retos se cumplen. La Alternativa 4.2, similar a la Alternativa 4.1, ofrece la ventaja de reducir significativamente la incertidumbre debida a la perturbación causada por la respiración endógena. La Alternativa 4.3 utiliza una medición del estado inicial del $OMUR$ para eliminar el problema de la detección del final de reacción y facilita el diseño al modificar las funciones del E - SS de manera que garantiza que, aún usando la función perturbada, se respeta la zona practi-óptima original. La Alternativa 4.4 es similar en su filosofía a la Alternativa 4.3 y, además, reduce sustancialmente la incertidumbre causada por la respiración endógena usando la misma estrategia para ello que la Alternativa 4.2.

En conclusión, el *ED-TOC* permite satisfacer todos los retos planteados cuando se aplica al control de tiempo óptimo de procesos degradadores de sustrato. Es totalmente robusto contra la incertidumbre explícita en todos sus parámetros. Su robustez ante una transformación lineal de su entrada es total, *i.e.* puede multiplicarse por cualquier constante positiva desconocida, y esto incluye cualquier perturbación implícita de los parámetros del modelo que se involucren en el cálculo (en línea) del *OMUR*. La robustez en contra de perturbaciones no estructuradas en la variable calculada (y) que alimenta al *E-SS* es marginal, con un margen tan alto como se desee, a costa de reducir gradualmente la optimalidad del controlador al aumentar dicho margen.

5. CONTROL DEL LOTE-ALIMENTADO PARA PROCESOS PRODUCTORES DE BIOMASA

Cuando un proceso produce en cada tanda una cantidad de nueva biomasa tal que dicho incremento no pueda ya considerarse una perturbación pequeña, *i.e.* α_B es más grande de lo sugerido en la Definición 4.1 (pág. 96), entonces no es posible aplicar directamente los resultados del Capítulo 4. Si se intentase hacerlo, el índice de optimalidad garantizable sería demasiado bajo para resultar útil, debido a que esos resultados fijan condiciones suficientes más exigentes que lo rigurosamente necesario *i.e.* suponen el peor caso posible para la forma de la perturbación. Sin embargo, si se toma en cuenta la estructura en el tiempo de la perturbación, *i.e.* el crecimiento tipo exponencial de la Biomasa, es posible suavizar dichas condiciones incluso hasta el punto donde, rigurosamente, se vuelvan necesarias además de suficientes.

5.1. Alternativas para usar el *ED-TOC* en procesos productores de biomasa

En esta sección se estudiarán tres alternativas que posibilitan aplicar el *ED-TOC* a procesos productores de biomasa. La primera, al igual que se hace en muchos casos de ingeniería, consiste en modificar la visión del problema de modo que se adapte a la forma para la cual ya existe una solución propuesta *i.e.* que un problema de producción de biomasa pueda verse como uno del tipo degradador de sustrato. La segunda alternativa se aplicaría cuando lo anterior no sea posible. Consiste en estudiar las condiciones rigurosas de aplicación del *ED-TOC*. Si el crecimiento de la biomasa fuese tan rápido que no se pudiera garantizar un comportamiento satisfactorio del *ED-TOC* mediante la alternativa anterior, una última propuesta, presentada al final de esta sección, brinda una idea para mitigar su efecto perturbador.

En el presente capítulo se enfocará toda la atención al crecimiento de biomasa como única perturbación de γ . No se hará tampoco diferenciación entre la Clase A y la Clase B *i.e.* se usará el modelo genérico de la ecuación

$$\chi = (k_p \mu_t + c)B, \quad (5.1)$$

la cual se ajusta tanto a la ecuación (4.3) de la Clase A (con $k_p = k_{PG}$ y $c = 0$) como a la (4.15) de la Clase B (con $k_p = k_2$ y $c = b$). Para el E -SS se usará la Tabla 4.1 la cual es la más general y cubre ambos casos.

5.1.1. Proceso productor de biomasa que en cada segmento se comporta aproximadamente como degradador de sustrato

En la sub-sección 4.2.2 (pág. 97) se desarrolló un método para considerar el crecimiento de biomasa como una perturbación de γ , acotada por α_B (Definición 4.1, pág. 96). Ese análisis arrojó condiciones suficientes para obtener un funcionamiento practi-óptimo del proceso aun si la biomasa crecía instantáneamente (desde B_0 hasta B_j) en cualquier momento de la reacción. Pero en realidad el crecimiento de la biomasa sigue una ley exponencial. Por tanto es posible encontrar condiciones menos exigentes dividiendo el problema en segmentos (Definición 3.2, pág. 66) *i.e.* considerar cada segmento como una reacción independiente. De esa manera el único crecimiento que necesita acotarse es el de cada segmento individual. Para el segmento $k^{\text{ésimo}}$ las fórmulas de la Definición 4.1 (pág. 96) pueden reescribirse así:

$$B_{m.k} = \frac{B_k + B_{k-1}}{2} ; B_{d.k} = \frac{B_k - B_{k-1}}{2} ; \alpha_{B.k} = \frac{B_{d.k}}{B_{m.k}} .$$

Para el diseño del E -SS basta encontrar el máximo factor de incertidumbre y utilizarlo a modo de α_B , *i.e.* reemplazando la Definición 4.1 (pág. 96), usando la ecuación

$$\alpha_B = \max_k (\alpha_{B.k}) ; \text{ para } k = 1, \dots, n. \quad (5.2)$$

A modo de ejemplo, si un proceso produjese solamente un uno por ciento de biomasa durante cada segmento (*i.e.* $B_{k+1} = 1.01B_k$), y cada tanda ED -TOC tuviese 30 ciclos ON/OFF (*i.e.* 70 segmentos), podría duplicar su biomasa en una sola tanda (*i.e.* $1.01^{70} = 2.01$). Según la Definición 4.1 dicho proceso no podría, por tanto, considerarse del tipo degradador de sustrato. Sin embargo, cada segmento individual sí. Entonces, dado que el E -SS borra su memoria al iniciar cada nuevo segmento, es posible aplicar, usando el α_B de la ecuación (5.2), los resultados de la sub-sección 4.2.2.

5.1.2. Condiciones rigurosas para el E -SS en procesos productores de biomasa

En esta sub-sección se explotará el hecho de que la biomasa es una variable estrictamente creciente que puede acotarse cuando el segmento analizado vive en Ω_{sneg} *i.e.* cuando $\mu_t \in [p_{\text{sneg}}\mu^*, \mu^*]$. Usando las ecuaciones (2.5) y (2.4) es fácil encontrar la dinámica de las cotas de la biomasa total para dicho segmento:

$$\frac{d(XV)}{dt} = \frac{dX}{dt}V + \frac{dV}{dt}X = \mu XV ,$$

y recordando que $B = XV$ se obtiene que

$$\frac{dB}{dt} = \mu B . \quad (5.3)$$

Solucionando para las cotas del Segmento $k+1$ se obtiene la cota (creciente) inferior para $t \geq t_k$

$$B^- = B_k e^{p_{\text{sneg}}\mu^*(t-t_k)} ,$$

y la cota (creciente) superior para $t \geq t_k$

$$B^+ = B_k e^{\mu^*(t-t_k)} . \quad (5.4)$$

Criterio 5.1. Se elige $P^+ = 1$, en la Tabla 4.1, con el interés de facilitar el estudio de las condiciones rigurosas para una adecuada detección de los eventos que generan el zigzag ($e_{1.2}$ y $e_{2.1}$) y que dependen de la ecuación (3.4).

Debe aclararse que el Criterio 5.1 solamente es apto en caso de perturbaciones crecientes, como el caso bajo estudio, según lo evidencian las cotas de la ecuación (5.3).

Al usar el Criterio 5.1, el estudio del tipo de errores de detección producidos en $e_{1,2}$ y $e_{2,1}$ de la Tabla 4.1 se reduce a analizar $\varepsilon_{\gamma}(1)$, de la ecuación (3.4). Reescribiéndola para dicho caso se tiene que los eventos considerados se disparan cuando

$$\underline{\gamma} < \underline{\gamma}_k^* , \quad (5.5)$$

donde $\underline{\gamma}_k^*$ viene dado por la ecuación (3.3) y es el máximo valor alcanzado por $\underline{\gamma}$ en lo que va transcurrido del segmento bajo análisis. La desigualdad (5.5) quiere decir que el evento se dispara en el primer momento en el cual $\underline{\gamma}$ decrezca. Por tanto, en términos de la variable considerada en la ecuación (5.1), dicho disparo se producirá cuando

$$\frac{d((k_p \mu_t + c)B)}{dt} < 0 . \quad (5.6)$$

Esta desigualdad aporta un primer criterio de descarte para el uso del E -SS. Si B crece tan rápidamente que con ello enmascara el decrecimiento de μ_t de modo tal que dicha desigualdad nunca se cumpla, entonces el evento deseado jamás será detectado. Es más, para que el ED -TOC pueda operar practi-óptimamente, no sólo es necesario que (5.6) se cumpla, sino que lo haga antes de que el estado del proceso abandone a Ω_{sng} . Desarrollando dicha desigualdad se obtiene

$$B \frac{d(k_p \mu_t + c)}{dt} < -(k_p \mu_t + c) \frac{dB}{dt} , \quad (5.7)$$

donde el miembro derecho siempre es negativo o cero y B , en el miembro izquierdo, es siempre positivo (recordar que $k_p > 0$ y $c \geq 0$) *i.e.* la única forma de disparar el evento, si es que se dispara, es cuando μ_t decrezca.

Recuérdese que, para un segmento zigzag, μ_t siempre crece cuando la trayectoria se aproxima a la superficie singular, y siempre decrece al alejarse. Por tanto, si B fuese constante, el miembro derecho de la desigualdad (5.7) sería siempre cero y el evento se dispararía justo cuando el proceso cruza la superficie singular. Pero, como B siempre crece, entonces la única manera de satisfacer alguna vez la desigualdad (5.7) es después de cruzar la superficie singular *i.e.* los errores de detección en este caso son siempre mayores que cero (retardantes). Esto es bueno pues, como se mostró previa-

mente, el *ED-TOC* se comporta practi-óptimamente robusto aún en presencia de errores retardantes concatenados, siempre que sean acotados. Así que solamente resta averiguar bajo qué condiciones pueden acotarse dichos errores.

Reemplazando la ecuación (5.3) en la desigualdad (5.7) se obtiene

$$B \frac{d(k_p \mu_t + c)}{dt} < -(k_p \mu_t + c) \mu_t B \quad ,$$

y dado que c y k_p son constantes, se divide por $k_p B > 0$, con $k_c = c/k_p$, para obtener

$$\frac{d\mu_t}{dt} < -(\mu_t + k_c) \mu_t \quad . \quad (5.8)$$

Condición 5.1. El cumplimiento de la desigualdad (5.8), para al menos algún $\mu_t \in [p_{sng} \mu^*, \mu^*]$ (o equivalentemente para algún $S \in [S_{m\acute{a}x}, S_{m\acute{i}n}]$), es condición necesaria y suficiente para garantizar que el segmento en consideración termina antes de abandonar la zona practi-óptima *i.e.* si todos los segmentos del zigzag la cumplen entonces el *ED-TOC* se desempeñará practi-óptimamente.

Nota: Para la Clase A se usa $k_c = 0$; Para la Clase B se usa $k_c = b/k_2$.

La Condición 5.1 exige un conocimiento detallado del modelo y de la dinámica del proceso. Sin embargo es posible utilizar la definición de μ_t para lograr una condición más útil (operacionalmente) aunque sea solamente suficiente.

Supuesto 5.1. μ es concava en la zona practi-óptima.

Esto quiere decir que $\frac{d^2 \mu}{dS^2} < 0$ en $S \in [S_{m\acute{a}x}, S_{m\acute{i}n}]$.

Nota: Este supuesto es natural para índices de optimalidad cercanos a la unidad, e incluso no tan cercanos p.ej. ver Figura 2.12.

Ahora es necesario analizar cada caso, para los dos valores posibles de Q .

Condición de optimalidad cuando $Q = 0$

Evaluando en el límite izquierdo de la zona practi-óptima la desigualdad (5.8), y usando el apóstrofe para indicar derivación respecto a su variable (*i.e.* $\eta'(v) := d\eta/dv$), se obtiene

$$\mu'(S_{\min}) \frac{dS}{dt} < -(p_{sng} \mu^* + k_c) p_{sng} \mu^* . \quad (5.9)$$

El Supuesto 5.1 sugiere que, en la medida en que la desigualdad (5.9) se cumpla de manera marginal, la detección del evento se producirá en los límites de la zona practi-óptima. Pero si la desigualdad es fuerte, el evento será detectado más adentro de dicha zona *i.e.* más robustamente.

Reemplazando la ecuación (2.3), para $Q = 0$, en la desigualdad (5.9), se obtiene

$$-\mu'(S_{\min}) k_1 p_{sng} \mu^* X < -(p_{sng} \mu^* + k_c) p_{sng} \mu^* .$$

Dado que todos los términos son positivos, despejando X se tiene

$$X > \frac{p_{sng} \mu^* + k_c}{k_1 \mu'(S_{\min})} . \quad (5.10)$$

Criterio 5.2. Dada una cota del índice de optimalidad ($p_{sng} < 1$), la desigualdad (5.10) expresa la condición de concentración de biomasa para garantizar que el E -SS detecta adecuadamente el evento $e_{2,1}$ *i.e.* que efectúa correctamente la transición *bang-bang* del estado σ_2 ($Q = 0$) al estado σ_1 ($Q = Q_{max}$). Por tanto siempre existirá un valor de biomasa, seleccionable en el diseño del bio-proceso, que permita satisfacer dicha condición para cada segmento de la reacción.

Expresado de otra manera, si la biomasa fuese conocida en cada segmento, dicha desigualdad permite establecer el máximo índice de optimalidad alcanzable en cada transición.

Una forma de garantizar el cumplimiento del criterio es suponer el peor caso posible, y es que la biomasa inicial ($B_0 = X_0 V_0$) no crece durante el llenado y que este sucede muy rápido. Por tanto su mínima concentración se obtendría al terminar de llenar el tanque ($V = V_f$). Esto permite establecer un criterio de diseño, suficiente pero no necesario, para el bioproceso, así:

Criterio 5.3. Dado un índice de optimalidad ($p_{sng} < 1$), la desigualdad

$$X_0^- > \frac{p_{sng} \mu^{*+} + k_c^+ V_f}{k_1^- \mu'^- (S_{mín})} V_0 \quad (5.11)$$

expresa la condición de concentración de biomasa inicial práctica para garantizar que el E -SS detecta el evento $e_{2,1}$, con un error acotado, en cualquier momento de la reacción *i.e.* que efectúa practi-óptimamente la transición del estado σ_2 ($Q = 0$) al estado σ_1 ($Q = Q_{max}$). Por tanto permite garantizar que siempre existirá algún valor de biomasa inicial que satisface dicha condición para todo segmento de la reacción.

Resultado 5.1. La desigualdad (5.11), del Criterio 5.3, toma en cuenta el peor caso de las incertidumbres en todos los parámetros necesarios para calcular el mínimo valor de la cota mínima de la biomasa inicial, de modo que pueda garantizarse un error acotado en la detección de $e_{2,1}$. Es importante resaltar que dicho resultado no depende del valor del flujo de entrada máximo ($Q_{máx}$) siempre que satisfaga la Condición 2.8 (mejorabilidad, pág. 50).

Conceptualmente este resultado puede interpretarse así: En el momento en que el control ingresa al estado σ_2 existe en el tanque una cantidad finita de sustrato, y ya no se agregará más (durante ese segmento particular). Por tanto, si todos los demás parámetros son inmodificables, la cantidad de biomasa presente es la que decidirá la velocidad a la cual dicho sustrato se degrada y, en consecuencia, es la que decide a que velocidad cambia S . Por tanto también afecta la velocidad a la que cambia μ_t . Sin embargo, la cantidad de biomasa que puede llegar a producirse es finita y acotada, dado que el sustrato no será repuesto durante el proceso de conversión. En conclusión,

siempre será posible seleccionar un valor de concentración de biomasa capaz de lograr que la velocidad del aumento de biomasa sea suficientemente pequeña comparada con la velocidad de cambio de μ .

Condición de optimalidad cuando $Q = Q_{max}$

Evaluando, en el límite derecho de la zona practi-óptima, la ecuación (5.8) se obtiene

$$\mu'(S_{m\acute{a}x}) \frac{dS}{dt} < -(p_{sng} \mu^* + k_c) p_{sng} \mu^* . \quad (5.12)$$

Si la desigualdad anterior se cumple de manera marginal y si el Supuesto 5.1 se satisface, la detección del evento se producirá en los límites de la zona practi-óptima. Pero si la desigualdad es fuerte, el evento será detectado más adentro de dicha zona *i.e.* más robustamente.

Reemplazando la ecuación (2.3), para $Q = Q_{m\acute{a}x}$, en la (5.12) se obtiene

$$-\mu'(S_{m\acute{a}x}) [-k_1 p_{sng} \mu^* X + \frac{Q_{m\acute{a}x}}{V} (S_i - S_{m\acute{a}x})] < -(p_{sng} \mu^* + k_c) p_{sng} \mu^* ,$$

y dado que $\mu'(S_{m\acute{a}x}) < 0$ (Condición 2.7, pág. 41) se tiene

$$\frac{Q_{m\acute{a}x}}{V} (S_i - S_{m\acute{a}x}) - k_1 p_{sng} \mu^* X > \frac{(p_{sng} \mu^* + k_c) p_{sng} \mu^*}{-\mu'(S_{m\acute{a}x})}$$

$$\frac{Q_{m\acute{a}x}}{V} (S_i - S_{m\acute{a}x}) > \frac{(p_{sng} \mu^* + k_c) p_{sng} \mu^*}{-\mu'(S_{m\acute{a}x})} + k_1 p_{sng} \mu^* X ,$$

y suponiendo que $S_i > S_{m\acute{a}x}$ se obtiene

$$\frac{Q_{m\acute{a}x}}{V} > \frac{p_{sng} \mu^*}{(S_i - S_{m\acute{a}x})} \left(\frac{(p_{sng} \mu^* + k_c)}{-\mu'(S_{m\acute{a}x})} + k_1 X \right) .$$

Criterio 5.4. Dada una cota del índice de optimalidad (p_{sng}), la desigualdad (5.10) expresa la condición del término de dilución ($D = Q/V$) para garantizar

que el E -SS detecta adecuadamente el evento $e_{1,2}$ i.e. que efectúa óptimamente la transición del estado σ_1 ($Q = Q_{max}$) al estado σ_2 ($Q = 0$). Por tanto permite establecer que siempre existirá un valor de dilución ($D_{máx}$) que permita satisfacer dicha condición para cada segmento de la reacción.

Expresado de otra manera, si la dilución máxima ya está prefijada, dicha desigualdad permite establecer el máximo índice de optimalidad alcanzable en dicha transición.

Una forma de garantizar el cumplimiento de la condición es suponer el peor caso posible, que el tanque esté lleno ($V = V_f$), justo cuando la dilución será mínima. Esto permite establecer un criterio de diseño, suficiente pero no necesario, para el bioproceso, así:

Criterio 5.5. Dada una cota del índice de optimalidad (p_{sng}), la desigualdad

$$Q_{máx}^- > \frac{V_f p_{sng} \mu^{*+}}{(S_i^- - S_{máx}^+)} \left(\frac{(p_{sng} \mu^{*+} + k_c^+)}{-\mu^{*+} (S_{máx}^+)} + k_1^+ X^+ \right) \quad (5.13)$$

expresa la condición del flujo máximo ($Q_{máx}$) suficientes para garantizar que el E -SS detecta adecuadamente el evento $e_{1,2}$ i.e. que efectúa óptimamente la transición del estado σ_1 ($Q = Q_{max}$) al estado σ_2 ($Q = 0$) en cualquier momento necesario de la reacción. Por tanto permite establecer que siempre existirá un valor de flujo diseñable ($Q_{máx}$) que permita satisfacer dicha condición para todo segmento de la reacción.

Resultado 5.2. La desigualdad (5.13), del Criterio 5.5, toma en cuenta el peor caso de las incertidumbres en todos los parámetros necesarios para calcular, nominalmente, el mínimo valor de la cota mínima del flujo máximo. Es importante resaltar que dicho resultado no afecta al Resultado 5.1, y por tanto el proceso de diseño puede ser directo (no necesita iterar).

Conceptualmente este resultado puede interpretarse como sigue: El crecimiento de la biomasa está acotado, en cada segmento, por la ecuación (5.4). En consecuencia

no importa qué tan rápido se alimente el sustrato, no puede producirse biomasa más rápido que esa cota. Por el contrario, mientras más rápido se alimente sustrato adicional, más fuerte será el efecto bola de nieve y por tanto más rápidamente se llegará a incrementar la concentración de sustrato hasta el límite de la zona practi-óptima, y menos tiempo habrá para producir biomasa, *i.e.* el incremento de biomasa es menor en el segmento en consideración mientras más alto sea el flujo de alimentación (si todos los demás parámetros son los mismos).

En conclusión, siempre será posible seleccionar, nominalmente, un valor de flujo de entrada para el cual el error de detección de $e_{1,2}$ sea acotado.

Criterios de optimalidad

El Criterio 5.2 (pág. 116) y el Criterio 5.4 combinados permiten establecer que, rigurosa y nominalmente, siempre es posible diseñar el bioproceso de modo que se pueda alcanzar cualquier índice de optimalidad deseado, de manera robusta. El Resultado 5.1 y el Resultado 5.2 llevan los criterios anteriores a una expresión más práctica, aunque más exigente *i.e.* no establecen condiciones necesarias. Estos permiten establecer, para la concentración de biomasa inicial (X_0) y para el máximo flujo de alimentación ($Q_{m\acute{a}x}$), las cotas mínimas que garantizan la practi-optimalidad del control del proceso. Sin embargo, en la práctica, es posible que dichos límites nominales sean inalcanzables o indeseables. En dicho caso no podría seleccionarse arbitrariamente cualquier índice de optimalidad sino que existiría una cota para él. Si dicha cota resulta inaceptablemente baja entonces se podría aplicar la estrategia que se describe en la sub-sección 5.1.3.

5.1.3. Propuesta para disminuir el efecto perturbador usando B

Si el crecimiento de biomasa es muy elevado en cada segmento y no es posible rediseñar el proceso para satisfacer los criterios de la sub-sección 5.1.2, aún es posible que se den otras condiciones para reducir la incertidumbre causada por el crecimiento de biomasa. Esto es especialmente cierto para procesos que no tengan tantas limitaciones e incertidumbres como los planteados en el caso PTAR. Si, p.ej., la caracterización del influente es buena, aún si el modelo del proceso presenta incertidumbres, es posible realizar un Estimador de la Biomasa por *software* (B -SS del inglés *Biomass SS*).

Es importante hacer énfasis en que el valor real de la biomasa total no es necesario para utilizar la ecuación (5.1). El problema es su variación en el tiempo y no su valor exacto. Por tanto si dicha variación puede minimizarse, mediante un B -SS, entonces la perturbación que genera se reduciría, posibilitando usar una de las alternativas presentadas en las sub-secciones precedentes. Dicha idea no alcanzó a ser explorada en profundidad durante esta tesis, pero se constituye en un posible, e interesante, tema de trabajo futuro. A continuación se describe su potencial.

Se sugerirá aquí una forma de usar la salida del B -SS, o incluso una medición aproximada de B (cuando tal tecnología esté disponible), aún si no es muy buena, para reducir la incertidumbre causada por el crecimiento de biomasa y poder así aplicar el ED -TOC. En lugar de usar la ecuación (5.1) para el estimado de γ se propone usar la relación $\gamma = \eta B / \underline{B}$; donde ηB es la parte medible.

En consecuencia el término perturbador es ahora la relación B/\underline{B} . Su valor no importa (*i.e.* no tiene que tender a uno). Lo que importa es que su variación, en cada segmento, sea pequeña. Si esto se cumple, entonces el problema puede resolverse de la misma manera que en la sub-sección 5.1.1, usando B/\underline{B} en lugar de B .

La ventaja principal es que no es necesario garantizar convergencia del B -SS. Basta con que la relación entre la variable nominal y su estimado no varíe "mucho" en el transcurso de un segmento.

Una consideración adicional es que, por la forma de funcionamiento del ED -TOC, se garantiza que la entrada al proceso es una excitación que favorece la estimación del B -SS *i.e.* en ningún caso se presentaría una "entrada mala" que pudiera perjudicar dicho proceso. Además cada evento generado por el E -SS, proporcionará información útil para ajustar, en línea, al B -SS. Se dispone también del máximo valor leído del producto ($\eta^* B$) en cada segmento, con lo cual se puede efectuar un ajuste de B , si se supone que η^* es invariante. Esto generaría una sinergia de información *i.e.* el B -SS permite al E -SS funcionar, y el funcionamiento del E -SS produce una información que podría permitir al B -SS desempeñar un mejor trabajo.

5.2. Evaluación de los siete retos: caso productor de biomasa

En la Sección 4.4 se evaluó cómo, al usar el *ED-TOC*, todos los retos planteados en la Introducción (pág. 20), se cumplían totalmente para los procesos degradadores de sustrato. Se establecieron las metodologías para analizar, y obtener, la operación practi-óptima, totalmente robusta contra incertidumbres en los parámetros nominales del proceso. En la Sección 5.1 se dejó de lado ese asunto para facilitar el estudio de la perturbación causada por el crecimiento acelerado de la biomasa. Se obtuvieron criterios que permiten diseñar el bioproceso, escogiendo la biomasa inicial y el flujo de influente, de modo que para cualquier modelo inhibitorio y para cualquier juego de coeficientes de conversión siempre fuese posible satisfacer cualquier índice de optimalidad dado. Si los valores necesarios resultasen imprácticos, entonces se sugirió la manera de disminuir la perturbación cancelando, mediante estimaciones y/o mediciones, el efecto del crecimiento de la biomasa.

En conclusión el *ED-TOC* permite, nominalmente, satisfacer todos los retos planteados también cuando se aplica al control de tiempo óptimo de procesos productores de biomasa.

Una versión preliminar del material presentado en este capítulo se encuentra en Moreno *et al.* (aceptado 2005). Otra versión, con un ángulo diferente para abordar el problema, se encuentra en Betancur *et al.* (en prensa 2005a). Allí se describen condiciones suficientes para garantizar el buen funcionamiento del *ED-TOC* aún si $P < 1$, lo cual tiene la ventaja potencial de permitir incorporar, de manera más natural, el análisis de otras perturbaciones adicionales a la del crecimiento de la biomasa.

6. APLICACIONES: RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se presentan dos aplicaciones que validan la funcionalidad práctica del *ED-TOC*.

La primera es un caso degradador de sustrato y constituye un paso exitoso en miras a la solución del problema del tratamiento del AR industrial contaminada con compuestos orgánicos.

La segunda aplicación se realizó mediante simulaciones y consistió en comparar la propuesta *ED-TOC* con la propuesta del *Adaptive Extremum-Seeking (AES)* para un caso productor de biomasa.

6.1. Aplicación experimental degradadora de sustrato:

Tratamiento de AR con fenoles

Los resultados presentados en esta sección constituyen una fracción de los obtenidos durante el proyecto *EOLI*, aquellos de interés desde el punto de vista del control óptimo del proceso. En Moreno-Andrade *et al.* (2005) pueden encontrarse referenciados otros datos y temas desde el punto de vista del bioproceso pero que, a pesar de su gran importancia, no son de relevancia inmediata para el tema central de esta tesis p.ej. efectos de la procedencia de la biomasa, de su forma de aclimatación, de los ayunos, de variaciones en la aeración, etc.

La mayor parte de los resultados experimentales provienen del trabajo en un reactor de laboratorio. También se realizaron, para la condición estándar, escalamientos en una planta piloto de campo con una capacidad dos órdenes de magnitud superior.

6.1.1. Métodos y Materiales

Por completitud se hará a continuación un breve resumen de los métodos y materiales utilizados por el grupo encargado de realizar la experimentación y el análisis comparativo entre las estrategias de control *FTC* y *ED-TOC*.

Hardware

El reactor de laboratorio (EOLI-UNAM-SBR-01) utilizado y sus componentes pueden apreciarse en la Figura 6.1. La interfaz de datos al proceso se realizó mediante *hardware* de *National Instruments* i.e. una tarjeta *I/O PCI6025E* insertada directamente en la PC. Se dotó de un sensor de *DO* (*COS4 Endress+Hauser*) y de bombas peristálticas controlables (*Cole-Palmer 7523 Masterflex*). No dispone de sensor de volumen, razón por la cual este se estima a partir de la calibración y comando de las bombas. Un sistema independiente controla la temperatura del proceso ($20 \pm 1^\circ\text{C}$) para minimizar los efectos que su variación traería en el modelo nominal.

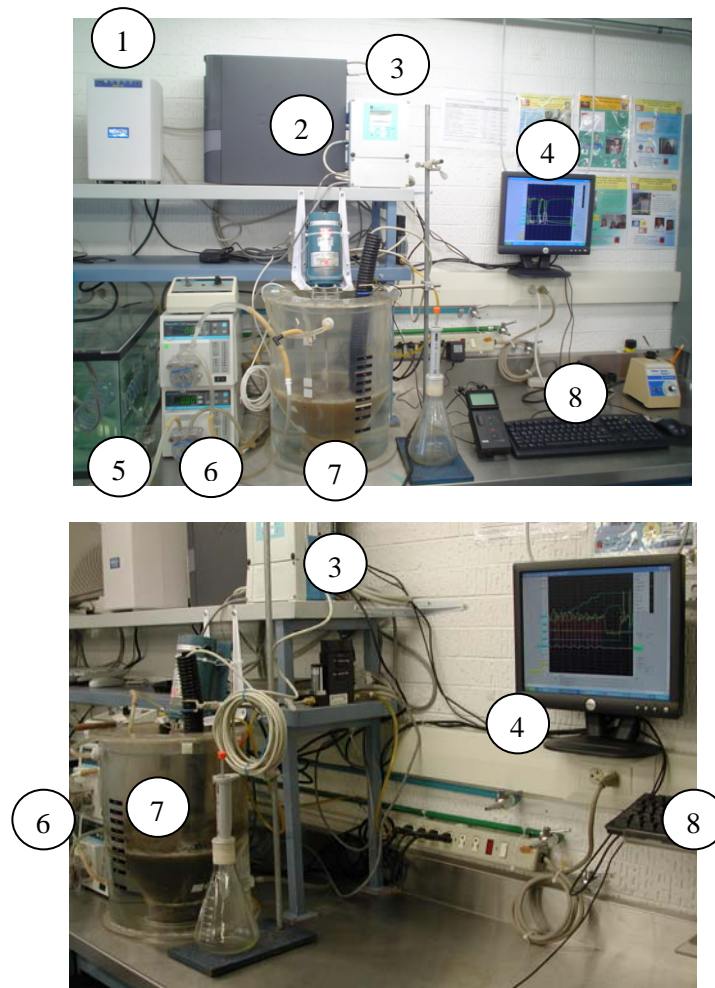


Figura 6.1. *SBR* de laboratorio (EOLI-UNAM-SBR-01).

Arriba: panorámica; Abajo: Detalle.

1. *UPS*, 2. PC de Control, 3. Transmisor de *DO*, 4. Interfaz Visual, 5. Tanque regulador de temperatura, 6. Bombas de influente y efluente, 7. Tanque del *SBR*, 8. Interfaz de entrada de datos.

El reactor de campo (EOLI-UNAM-SBR-02) se aprecia en la Figura 6.2. La interfaz de datos al proceso se realizó mediante un módulo *I/O* especializado marca *Beckhoff*, el cual se comunica via un enlace *ethernet* con la PC, usando el protocolo *MODBUS*. La instrumentación consta de sensores de *DO* y de volumen así como de temperatura. Este último resultará de interés para estudiar los efectos de la temperatura en el desempeño del reactor, ya que para este tamaño de reactor en este tipo de aplicación ya resulta impráctica su regulavi6n. Se instrumentaron tambi6n sensores de pH y de ORP con fines de monitoreo y supervisi6n.

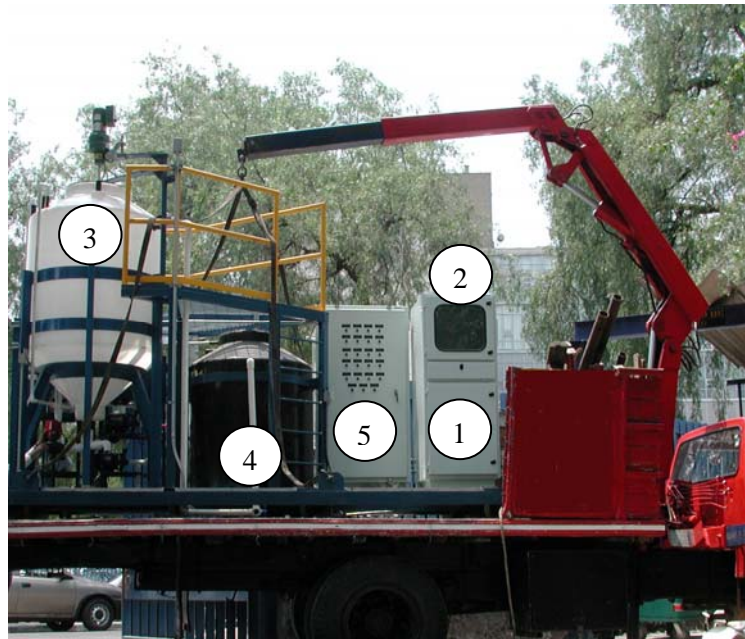


Figura 6.2. *SBR* piloto a Escala de campo, portátil (EOLI-UNAM-SBR-02).

1. Tablero para PC de Control, 2. Interfaz Visual, 3. Tanque del *SBR*,
4. Tanque de igualaci6n, 5. Tablero el6ctrico y de mandos manuales.

Software: *BioReactor Control* (BioReC)

El *software* de control en tiempo real fue codificado usando el lenguaje *Labview*. Este *software*, en su versi6n completa, permite utilizar diferentes tipos de *hardware* y puede calibrarse para diferentes tipos de reactores. Incluye la implementaci6n de la estrategia *ED-TOC* pr6ctica y tambi6n de otras estrategias de control (p.ej. *FTC*, *VTC*) y de rutinas para capturar datos utilizables en la identificaci6n de par6metros del modelo del proceso (p.ej. para el k_{La}). La Figura 6.3 muestra parte de la interfaz gr6fica del usuario.

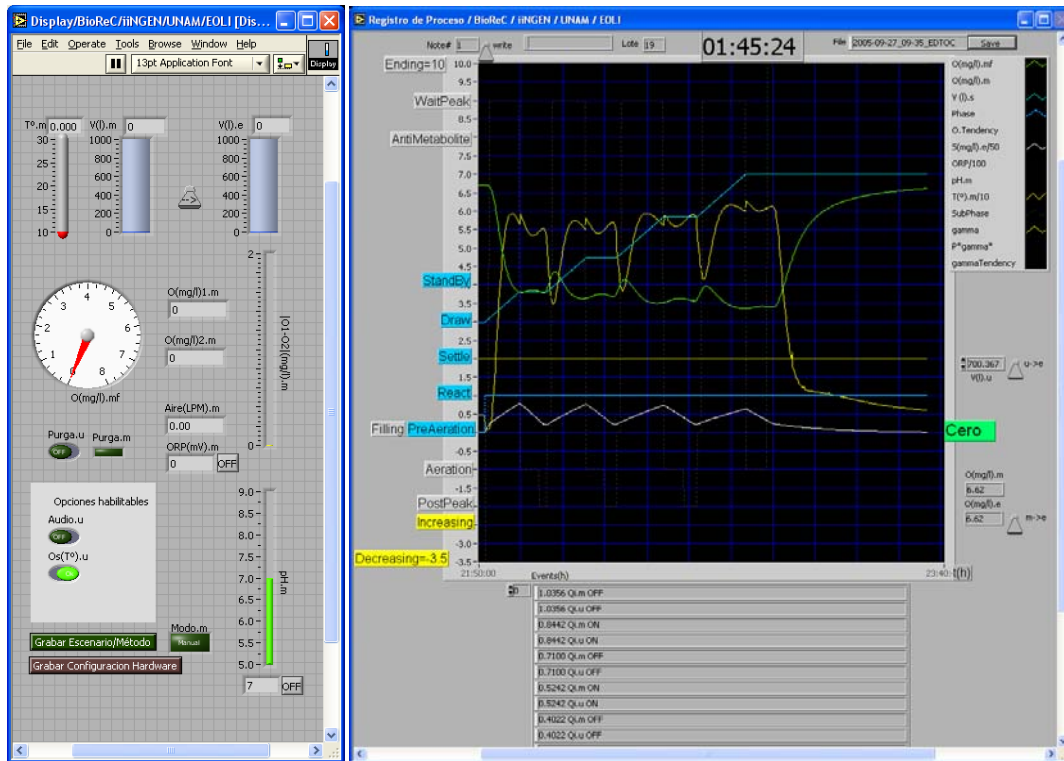


Figura 6.3. Interfaz gráfica de usuario del *software* BioReC.

Condiciones estándar del bioproceso

El tóxico modelo utilizado en el AR sintética como fuente única de carbón y energía fue el 4-clorofenol (**4CF**). Los nutrientes necesarios para el buen funcionamiento de la biomasa se adicionaron siguiendo las recomendaciones de AFNOR (1985).

Las condiciones estándar de operación para el lote *FTC* fueron seleccionadas por los expertos, *i.e.* los encargados del asunto referente al bioproceso dentro del proyecto *EOLI*, de la siguiente manera para el *SBR* de laboratorio (EOLI-UNAM-SBR-01):

- Tiempo de reacción/tiempo total del ciclo de tanda: 3.4h/4h
- Concentración del tóxico en el influente (S_i): 350 mg4CF/L
- Concentración de biomasa en el reactor (X_0): 2000 mgVSS/L
- Volumen inicial (V_0), final (V_f) y de intercambio: 3 L, 7 L, 57%
- Aeración: 1.5 L/min

Para probar las condiciones perturbadoras de picos de carga se aclimató primero el *SBR* a las condiciones estándar y luego se alimentó, durante una tanda aislada cada vez, con perturbaciones de concentración en el influente (S_i) que se incrementaron, con respecto al valor nominal estándar, hasta en 20 veces (2000 %).

Con el objetivo de estudiar el comportamiento en el largo plazo y la fiabilidad de la nueva estrategia de control, se realizaron también dos secuencias de 160 experimentos cada uno, usando exclusivamente la estrategia *ED-TOC* para el control del reactor, conservando todas las condiciones estándar del modo *FTC* a excepción del tiempo de reacción, el cual fue variable y dependía del propio *ED-TOC*.

Para el *SBR* piloto de campo (EOLI-UNAM-SBR-02) los valores estándar fueron seleccionados así:

- Tiempo de reacción/tiempo total del ciclo de tanda: 3.4h/12h
- Concentración del tóxico en el influente (S_i): 250 mg4CF/L
- Concentración de biomasa en el reactor (X_0): 1800 mgVSS/L
- Volumen inicial (V_0), final (V_f) y de intercambio: 450 L, 750 L, 40%
- Aeración: 135 L/min

Métodos analíticos

Los análisis de Sólidos Suspendidos Volátiles (*VSS*) fueron hechos de manera estandarizada (APHA, 1992) y usados para calcular la concentración de biomasa inicial (X_0). La concentración del sustrato (S) fue reportada *offline*, de muestras tomadas manualmente, usando una modificación de la técnica colorimétrica del método de la 4-aminoantipirina (APHA, 1992).

6.1.2. Modelo matemático y validación

Con el reactor del laboratorio se realizaron dos secuencias de experimentos alrededor de las condiciones estándar de operación en modo lote *FTC*. Cada una tuvo su propia inoculación de biomasa, pero ambos inóculos procedieron de la misma fuente.

Todos los procedimientos de la segunda secuencia fueron realizados de la misma forma que en la primera. Para distinguirlas, cada secuencia tomó el nombre de la fecha (año y mes) en que fue inoculada la biomasa *i.e.* 0307 y 0312. Combinando diferentes supuestos y metodologías se generaron 9 modelos candidatos. Una descripción completa del proceso de modelizado y de sus resultados se encuentra disponible en EOLI (2005), y un resumen en Betancur *et al.* (2005b). A continuación se presentan únicamente las conclusiones de ese estudio relevantes para esta tesis.

Identificación y variabilidad de parámetros

Se observó que para cada tanda individual era posible ajustar el modelo casuísticamente de manera correcta *i.e.* el algoritmo de identificación podía encontrar valores de los parámetros que, usados en un simulador, replicaban fielmente el resultado experimental de la tanda identificada. Sin embargo, el tratamiento estadístico de los parámetros para obtener un modelo unificado de cada secuencia, utilizando el grupo de experimentos seleccionados para identificación, ya no presentó un ajuste tan satisfactorio en todos los candidatos. Aunque para el candidato de mejor ajuste (EM1-A3, Anexo 2; **Error! No se encuentra el origen de la referencia.**) la variabilidad de los parámetros puede considerarse satisfactoria, en otros candidatos algunos de los parámetros variaron hasta un 25% para una confianza del 95%. La situación fue aún menos prometedora al utilizar esos parámetros con el grupo de experimentos seleccionados para validación. La variabilidad aumentó drásticamente al tratar de obtener un modelo unificado que explicase ambas secuencias de experimentos simultáneamente (EM1-BC3, Anexo 2; **Error! No se encuentra el origen de la referencia.**), pues en ese caso la variabilidad superó el 100%. Los mejores parámetros obtenidos por el candidato de mejor ajuste (EM1-A3) a la mejor secuencia (0307) son los siguientes:

$$b = 0.0059h^{-1}; k_L a = 16.8h^{-1}; k_1 = 3.7mg4CF / mgVSS; k_2 = 1.0363mgDO / mgVSS$$

$$\mu_o = 0.03735h^{-1}; K_I = 81.68mg4CF / L; K_S = 2.43mg4CF / L$$

y de aquí se obtienen los valores medios de $S^* = 15.01mg4CF / L$; $\mu^* = 0.0213h^{-1}$.

Producción de biomasa

Experimentalmente se comprobó que, en condiciones estándar, el crecimiento total de biomasa en cada tanda tuvo valores típicos del orden del 1%, y nunca superó el 2%, de la biomasa inicial (B_0). Por tanto el proceso de TAR tóxicas considerado puede clasificarse en el tipo de los procesos degradadores de sustrato. Adicionalmente, no se detectaron diferencias en la generación de biomasa al usar el *ED-TOC* en vez de *FTC*.

Estructura dinámica del modelo

Los resultados anteriores sugieren que la dinámica del modelo matemático representa de manera acertada a la del proceso práctico real y que no suceden variaciones rápidas importantes de los parámetros, al menos no dentro del lapso de una misma reacción. Sin embargo se presentan lentas pero importantes variaciones de los parámetros en el tiempo, *i.e.* con efectos perceptibles sólo en un horizonte de tiempo superior al de un lote estándar, motivadas por factores no claramente conocidos ni modelizables. El efecto variacional es aún mayor si, aún para el mismo reactor en las mismas condiciones estándar, se usa un diferente lote de inóculo, incluso cuando ambos provengan de la misma fuente.

Los resultados presentan un reto al controlador del proceso en el sentido de que no podría utilizar los valores identificados de los parámetros sin considerar dicha alta variabilidad en el mediano y largo plazo. Al mismo tiempo sugieren que la estructura dinámica del modelo es altamente confiable localmente en el tiempo.

Constantes de tiempo y retardos adicionales

- No se detectaron efectos apreciables de retardo por transporte u homogenización en ninguno de los dos *SBR*.
- En un ejercicio independiente, reportado en el Anexo 3, se modelizó el comportamiento del sensor de *DO*, que es del mismo tipo en ambos *SBR*. La conclusión es que puede representarse con fidelidad como un sistema de segundo orden, compuesto por una cascada normalizada de dos filtros de primer orden con constantes de tiempo de 36 seg y 72 seg respectivamente.

- El tiempo mínimo de conmutación sugerido para las bombas peristálticas fue de 10 seg debido a que es el tiempo que toma su arranque/parada tipo rampa.

6.1.3. Sintonía del *ED-TOC*

Usando el procedimiento sugerido en la Sección 3.5, considerando los datos anteriores, los límites del actuador $0 \leq Q \leq 22 \text{ L/h}$ (*LPH*), y analizando experimentalmente el comportamiento del lote *FTC* y los ruidos presentados en la señal $y = OMUR$, se decidieron los siguientes valores de sintonía del *ED-TOC* para el laboratorio (EOLI-UNAM-SBR-01)

$$T_c = 10 \text{ seg}; T_s = 3 \text{ min}; T_v = 0; T_{sv} = 3 \text{ min}; P = 0.9$$

y las cotas para el flujo máximo de alimentación: $5 \text{ LPH} < Q_{\max} < 22 \text{ LPH}$.

Los mismos parámetros *ED-TOC* fueron utilizados en la planta piloto de campo (EOLI-UNAM-SBR-02). El flujo máximo fue escalado proporcionalmente.

6.1.4. Resultados

Cinética estándar típica del sustrato

La Figura 6.4 muestra el comportamiento típico de la concentración de sustrato en el tanque del *SBR* de laboratorio para cinéticas *FTC* y para cinéticas *ED-TOC*. Se comprueba que, sin medirla en línea y usando únicamente la estimación del *OMUR* para su control, el *ED-TOC* sostiene dicha concentración variando de modo que “envuelve” a S^* . En la gráfica inferior (*ED-TOC*) las muestras del líquido del tanque fueron tomadas en los instantes de conmutación *bang-bang* y analizadas *offline* para determinar la concentración del sustrato (S) (cuadros azules). El *DO* se presenta en línea a trazos y el flujo (Q) en línea gruesa color gris.

Los resultados son similares para el *SBR* piloto de campo.

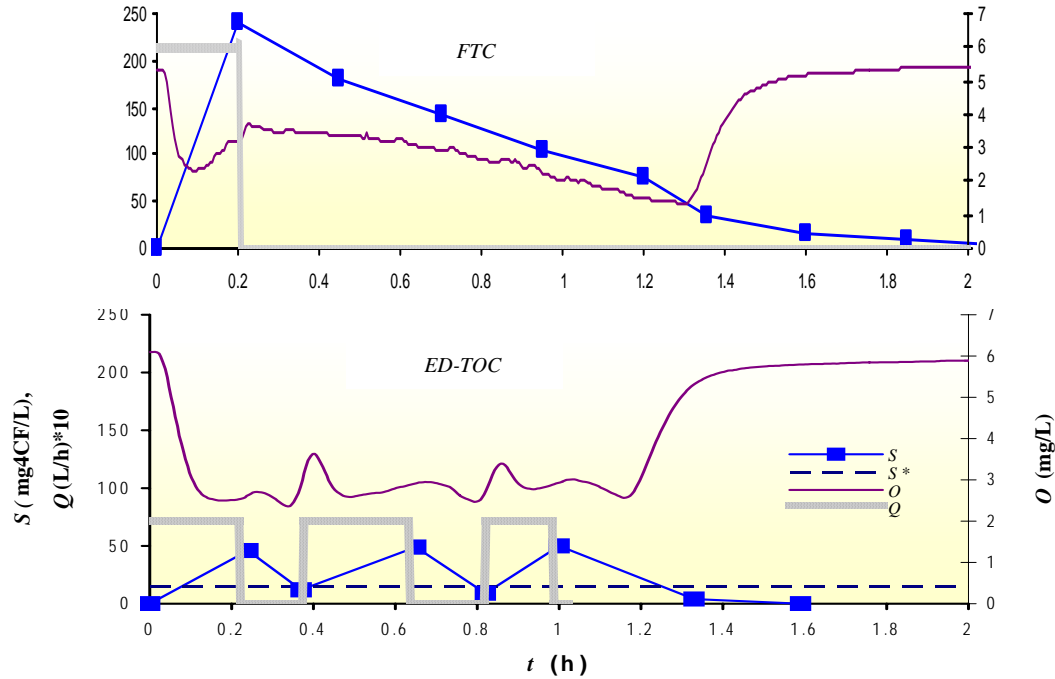


Figura 6.4. Cinética típica de S (EOLI-UNAM-SBR-01):

Mismas condiciones estándar para FTC (arriba) y $ED-TOC$ (abajo)

Cinética estándar típica del oxígeno disuelto y del $OMUR$

La Figura 6.5 muestra los dos comportamientos típicos para cada uno de los modos de control comparados (FTC vs. $ED-TOC$) en el reactor piloto de campo. Son similares en forma (escalados) a los observados en el reactor de laboratorio. La línea gris representa el estado de la bomba de influente ($ON := 1$; $OFF := 0$). El valor del flujo de alimentación es diferente para cada caso, del orden de 2800 LPM para la FTC y de 280 LPM para la $ED-TOC$. El volumen (v) correspondiente es representado por la línea oscura y continua a tramos (azul). La línea continua curvada (rosa) es el DO (O), y la segmentada (naranja) el cálculo del $OMUR$. Sobre dicha curva se encuentran marcados los instantes donde el $OMUR$ alcanza su máximo valor (círculos llenos), *i.e.* cuando $\gamma = \gamma_k^*$, y los instantes de conmutación (círculos vacíos) *i.e.* donde sucede $\gamma \leq P\gamma_k^*$. Los círculos más grandes (amarillos) representan el instante de cumplimiento de la meta del proeso (t_{mp}) y la flecha que los relaciona indica el ahorro en tiempo. Debe considerarse, sin embargo, que para la estrategia FTC dicho tiempo (t_{mp}) es desconocido y que la duración de la tanda es fijada por adelantado, en consecuencia el ahorro efectivo en tiempo total es mucho mayor.

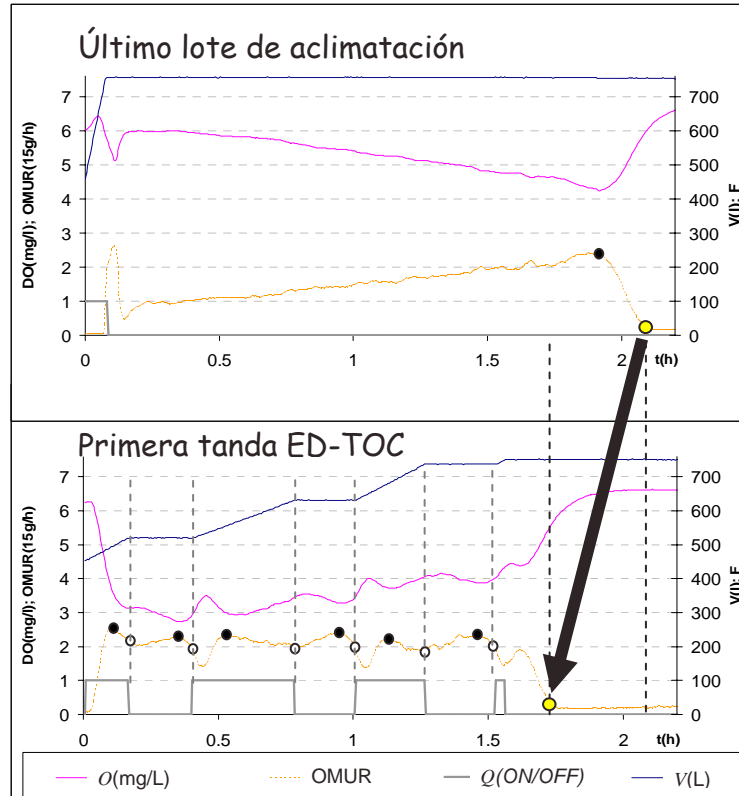


Figura 6.5. Cinéticas típicas (EOLI-UNAM-SBR-02) del $OMUR$ y DO Arriba para un lote estándar FTC . Abajo para una tanda estándar $ED-TOC$.

Efecto inhibitorio (bola de nieve) y perturbación de S_i

Al analizar el $OMUR$ para el lote FTC en la Figura 6.5 (superior), y comparar los valores luego del llenado y al final de la reacción, es importante notar que el efecto bola de nieve que se presenta no alcanza valores inhibitorios importantes, apenas del orden de 50%, precisamente porque la condición estándar se diseña para que sea así. Otro es el panorama cuando se presentan perturbaciones de picos de carga importantes en el influente, pues entonces el efecto bola de nieve se hace importante, y potencialmente dañino, en el FTC . Por tanto es en ese caso que se hace más evidente la ventaja ofrecida por la practi-optimalidad robusta del $ED-TOC$. La Figura 6.6 muestra las diferencias del tiempo de tanda al usar cada estrategia ante tales picos de carga importantes, con la salvedad que en este caso se supone conocida la perturbación del influente para así poder diluirlo antes de tratarlo con el FTC . De lo contrario, como muestra la Tabla 6.1 para la tasa total efectiva de reacción (q), el FTC no podría efectuar el tratamiento de los picos altos y, por el contrario, perdería la viabilidad del reac-

tor al inhabilitarse su biomasa permanentemente. Los resultados muestran la robustez del *ED-TOC* dado que rechaza las perturbaciones totalmente, *i.e.* no tienen efecto significativo en la tasa efectiva de reacción (q), lo cual se deduce del hecho de que el tiempo de reacción crece linealmente con la masa de sustrato a tratar, independientemente de su concentración en el influente *i.e.* mantiene al proceso operando en todos los casos en una misma zona donde no hay cambios apreciables de la tasa de reacción.

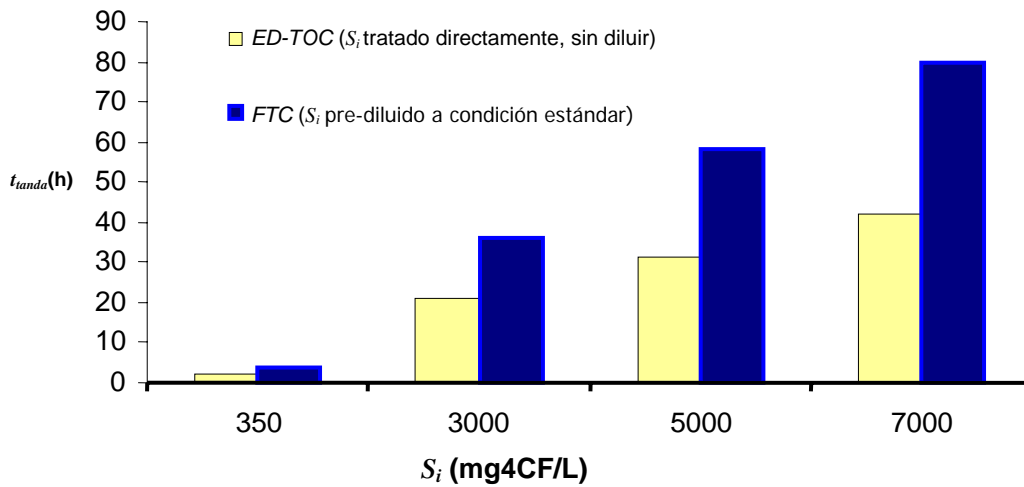


Figura 6.6. Comparación de t_{tanda} para perturbaciones conocidas del influente

Tabla 6.1. Efecto de un pico de carga perturbador (sin pre-dilución)

ESTRATEGIA DE CONTROL	S_i mg4CF/L	q durante el pico mg4CF/gVSS/h	q despues del pico mg4CF/gVSS/h
<i>FTC</i>	350	53.2±15.7	Es la condición estándar
	700	34.4	37.5
	1050	4.6	17.9
	1400	0.9	Total pérdida de actividad
<i>ED-TOC</i>	3000	41.3±5.9	No varía significativamente
	5000	49.1±0.7	<i>i.e.</i> la perturbación es rechazada por completo y no afecta las tandas siguientes.
	7000	54.5±1.9	

Comportamiento del *ED-TOC* en el largo plazo

Las secuencias de experimentos de largo plazo muestran que el *ED-TOC* se comportó de manera repetible, igual que para su condición estándar, y que la meta del proceso fue alcanzada, en todos los casos, con remoción del tóxico (4CF) superior al 99%.

Otras ventajas derivadas de la practi-optimalidad del *ED-TOC*

La reducción del tiempo de tanda es un objetivo doblemente interesante desde el punto de vista del control porque, en este caso, va adicionalmente ligado a factores económicos en el diseño y operación del bioproceso. Al reducir el tiempo de reacción se disminuyen también los requerimientos de aerar el tanque y de agitarlo, ahorrando con ello energía y alargando la vida de los actuadores. La reducción en tiempo de tratamiento, aunada a la posibilidad de tratar picos de carga sin tener que diluirlos previamente, permite disminuir el tamaño de reactores de nuevo diseño o, equivalentemente, aumentar significativamente la carga diaria aplicable a una instalación ya construida.

Se comparó el desempeño del *ED-TOC* con el *FTC* en condiciones estándar y también ante picos de carga. Para el primero no fue necesario diluir el influente, mientras que para el segundo fue indispensable o de lo contrario se inhabilitaría la biomasa durante los picos. Así, el tiempo de tratamiento *FTC* se calculó multiplicando el tiempo estándar del lote por el número de lotes necesarios para tratar la misma cantidad másica de sustrato que en el *ED-TOC* se pudo tratar en una sola tanda. Las ventajas comparativas obtenidas, a escala de laboratorio, se cuantifican en las tablas siguientes:

Tabla 6.2. Incremento en carga diaria aplicable

S_i mg4CF/L	Carga Aplicada ⁴ , kg DQO/m ³ d		Incremento (%) <i>ED-TOC</i> vs. <i>FTC</i>
	<i>FTC</i>	<i>ED-TOC</i>	
350	2.52	4.65	85
634	2.52	4.58	81
3000	2.52	4.11	63
5000	2.52	4.80	90
7000	2.52	4.77	89

⁴ La demanda química de oxígeno (DQO) es una medida relacionada a la cantidad de sustrato presente.

Tabla 6.3. Ahorro energético en aeración

S_i mg4CF/L	Volumen Aire, m ³		Ahorro Aire (%)
	<i>FTC</i>	<i>ED-TOC</i>	<i>ED-TOC vs. FTC</i>
350	0.29	0.18	38
3000	2.63	1.98	25
5000	4.39	2.70	39
7000	5.85	3.87	34

Tabla 6.4. Ahorro energético en agitación

S_i mg4CF/L	Ahorro Agitación (%) <i>ED-TOC vs. FTC</i>
350	38
3000	25
5000	39
7000	34

6.1.5. Posibilidades de Trabajo a Futuro

Tres líneas importantes para investigar se proponen luego de observar los resultados obtenidos con la aplicación del *ED-TOC* al caso modelo del TAR tóxicas.

Regulación del Flujo de Aire

Los ahorros en volumen de aire inyectado al reactor pueden aumentarse aún más si se minimiza el nivel de *DO* dentro del mismo. Los expertos consideran que un nivel de $O_{min} = 2 \text{ mg/L}$ es conveniente y que garantiza que no existirá estrés de la biomasa por carencia de oxígeno ni efectos apreciables en la tasa de reacción final. Por tanto resulta atractivo el reto de regular dicho nivel considerando los efectos que trae en el cálculo del *OMUR*, de modo que no afecte de manera alguna el desempeño del proceso controlado por el *ED-TOC*. Agregar la instrumentación que permita usar como variable de control al flujo de aire permitiría incrementar entonces el criterio de optimalidad no sólo a tiempo mínimo sino también a gasto mínimo de aire.

Aclimatación automática

Durante los primeros lotes en el proceso de aclimatación el consumo de oxígeno es pequeño y por tanto el cálculo del *OMUR* no es confiable, pues su magnitud es similar a la del ruido. Ese proceso se realiza manualmente con una estrategia de eficiencias fijas lo que requiere hacer cinéticas del sustrato para determinar en qué momento se ha cumplido la meta del proceso. Si se regula automáticamente el flujo de aire, como se sugirió en el apartado anterior, sería posible utilizar el *OMUR* para automatizar el proceso de aclimatación, *i.e.* determinar automáticamente el final de cada lote y comenzar el siguiente, hasta lograr las condiciones estándar. Incluso podría estudiarse la aplicación del mismo *ED-TOC* durante dicha aclimatación.

Adaptación del flujo de influente

El rango riguroso de selección para Q_{max} es muy amplio y puede cambiar dinámicamente, en especial si se consideran las perturbaciones de la concentración de tóxico en la entrada (S_i) como dinámicas. Si se acota dicho flujo adecuadamente puede elegirse, en cualquier momento durante la reacción, cualquier valor en el rango acotado. Sin embargo un menor valor minimiza la cantidad y los efectos de las conmutaciones *bang-bang* y brinda mayor margen de maniobra al controlador para responder a una perturbación tipo pico de carga, por lo cual es preferible sobre los demás. Esto hace interesante el estudio de mecanismos de adaptación para seleccionar dicho flujo máximo, dinámicamente, cercano al mínimo suficiente y necesario. Un algoritmo preliminar ya fue propuesto en Betancur *et al.* (2004a).

6.2. Aplicación simulada a un proceso de producción de biomasa

Se utilizó un caso de aplicación tomado de la literatura reciente (Titica *et al.*, 2003) a fin de efectuar un análisis comparativo entre el tiempo de procesamiento requerido por la estrategia *ED-TOC* y el requerido por el *Adaptive Extremum Seeking (AES)*, que es una estrategia de punta en el estado del arte.

6.2.1. Métodos

Se utilizó un simulador implementado en MATLAB. Se supusieron medibles la tasa del producto gaseoso (y_{PG}) para ambos controladores y, sólo para el *AES*, la concentración del sustrato en el tanque (S).

Para comparar el desempeño de ambos controladores se utilizó el índice de optimalidad I_t , de la ecuación (2.12), obtenido en los siguientes escenarios:

- 1) Condición estándar con los valores nominales perfectamente conocidos.
- 2) Condición estándar pero con los valores de los parámetros cinéticos mal conocidos *i.e.* el valor de S^* estimado es menor en un 50%.
- 3) Condición estándar pero con el valor de la concentración del sustrato inicial (S_0) mal conocido *i.e.* su lectura aumentada en un 50%.
- 4) Condición estándar pero con un error (20%) en el sensor que mide y_{PG} .
- 5) Condición estándar pero con un error (20%) en el sensor que mide S .
- 6) Condición estándar modificada de modo que $S_0 = S^*$ suponiendo que los parámetros cinéticos se conocen mal (+100% en \underline{S}^*). También se violó el supuesto de invariancia temporal del modelo (+100% en S^* durante $20h < t < 50$).

Adicionalmente, para el *ED-TOC*, se realizaron tandas virtuales para relacionar el índice de conmutación (P) con la frecuencia de conmutación *bang-bang*.

6.2.2. Modelo matemático y validación

El modelo corresponde a la Clase A. Las condiciones estándar y condiciones iniciales fueron las mismas usadas en el artículo de Titica *et al.* (2003). Para esta subsección se usarán las mismas unidades usadas en dicho artículo: gramos en vez de miligramos para las masas y también para las referidas en las concentraciones:

$$k_1 = 0.4 \text{ g / g}; k_{PG} = 1.0 \text{ g / g}; \mu_o = 0.53 \text{ h}^{-1}; K_I = 0.22 \text{ g / L}; K_S = 1.2 \text{ g / L}$$

$$S_0 = 2 \text{ g / L}; X_0 = 7.2 \text{ g / L}; S_i = 20 \text{ g / L}; V_0 = 1 \text{ L}$$

y de aquí se obtiene que $S^* = 0.5138 \text{ g/L}$; $\mu^* = 0.0935 \text{ h}^{-1}$.

Dado que el análisis de las propiedades del *AES* efectuado por los autores referenciados requiere un horizonte de tiempo (y volumen) infinito, entonces ellos no fijaron condiciones finales. Para lograr mayor realismo de la simulación, y dado que el proceso en la práctica es una tanda finita y discontinua, se agregarán las siguientes condiciones de meta del proceso: $V_f = 40 \text{ L}$; $S_f := 0.01 \text{ g/L}$

Producción de biomasa

En condiciones estándar el crecimiento total de biomasa en cada tanda tuvo valores del orden del 27000% ($B_0 = 7.2 \text{ g}$, $B_f = 1962.2 \text{ g}$), por tanto este proceso es productor de biomasa y no puede ser considerado del tipo degradador de sustrato.

6.2.3. Comparación con el *Adaptive Extremum Seeking (AES)*

La Tabla 6.5 muestra los resultados obtenidos al usar cada controlador comparado, bajo los diferentes escenarios explicados en la sección de métodos. En condiciones estándar el desempeño del proceso con ambos controladores fue equivalente. En todos los demás casos el índice de optimalidad del *ED-TOC* fue igual o superior al del *AES*.

Tabla 6.5. Comparación de optimalidad ante perturbaciones e incertidumbres

Escenarios de prueba para la comparación	I_t %	
	<i>ED-TOC</i>	<i>AES</i>
1. Estándar: $\mu_0 = 0.53$; $K_I = 0.22$; $K_S = 1.2$ ($S^* = 0.5138$), Todo conocido.	99.8	99.7
2. Mal dato inicial de parámetros cinéticos: $\mu_0 = 0.108$ $K_I = 1.645$ $K_S = 0.01$	99.8	89.5
3. Mal dato inicial de S_0 (incrementado 50%)	99.8	99.7
4. Error de medición en el sensor de y_{PG} : +20% en $t = (20,30) \text{ h}$	99.8	99.8
5. Error de medición en el sensor de S : +20% en $t = (20,30) \text{ h}$	99.8	99.8
6. $S_0 = S^*$, Mal dato inicial de parámetros cinéticos (S^* incrementado 100%), y S^* cambia para $t = (20,50) \text{ h}$ incrementándose en un 100%	99.1	96.5

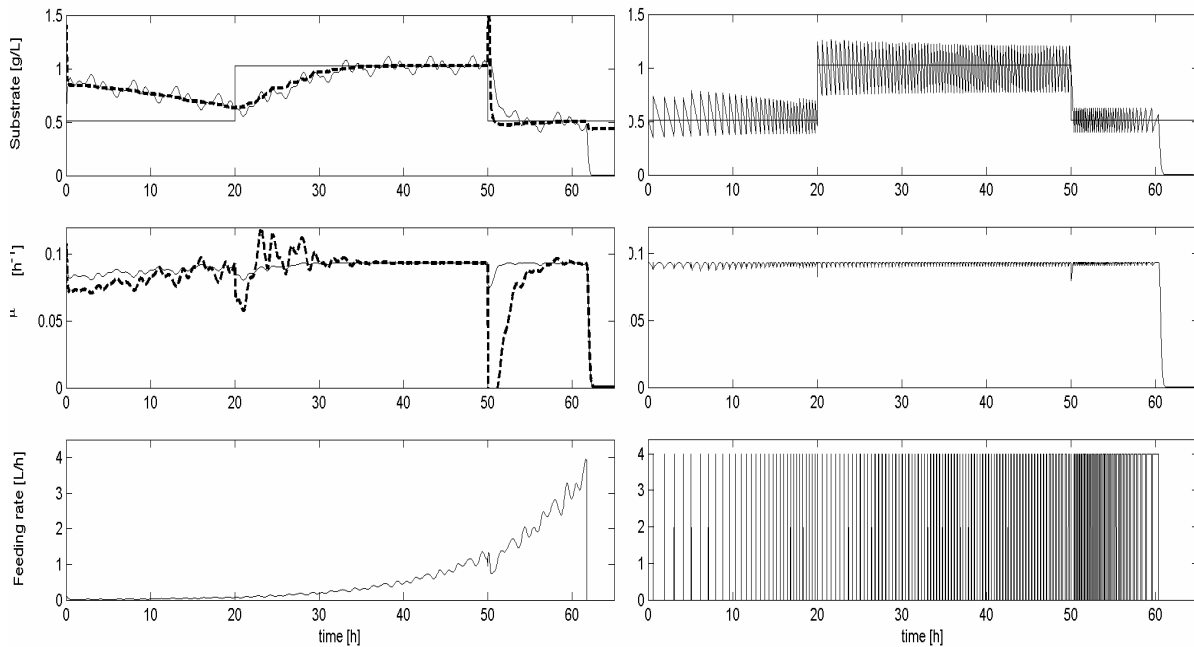


Figura 6.7. Simulación del Escenario 6 de la Tabla 6.5.

AES (izquierda) vs. *ED-TOC* (derecha)

La Figura 6.7 muestra la cinética de la concentración del sustrato, del coeficiente específico de crecimiento de biomasa y del flujo de alimentación para el escenario 6, el cual es el peor caso de los considerados en la Tabla 6.5.

De los resultados obtenidos se puede observar que la robustez del *ED-TOC* le permite conservar su desempeño en escenarios de perturbaciones e incertidumbres que afectan la otra ley de control (*AES*). Adicionalmente se observa claramente que la realización del primer arco *bang-bang* no es posible para el controlador *AES* dada su velocidad de convergencia. Este mismo *handicap* afecta la primera parte de la aproximación que realiza del arco singular. La Tabla 6.6 resume las diferencias entre ambos controladores. Nótese que, desde el punto de vista práctico, las principales limitaciones del *AES* se manifiestan al necesitar medir la concentración del sustrato (S) y al requerir un actuador de flujo variable para poder controlar la dilución ($D = Q/V$).

Tabla 6.6. Comparación de características de los controladores

Características	<i>ED-TOC</i>	<i>AES</i>
Variables Medidas:	V, y_{PG} (usada directamente como y)	V, S, y_{PG}
Variables controlada:	μ	S
Variable Manipulada:	Q	$D = Q/V$
Parámetros a Sintonizar:	P	$\gamma_{\mu}, \gamma_S, \gamma_i, k_z, k_{y,0}, k_d, \varepsilon, a$
Requiere conocer estas condiciones iniciales:	-	$S(0), y(0), \theta_{\mu}(0), \theta_S(0), \theta_i(0)$
Convergencia depende de:	Limitaciones del actuador	Parámetros de sintonía
Tipo de Control	Híbrido	Contínuo

6.2.4. Frecuencia de conmutación del *ED-TOC*

Usando las mismas condiciones estándar se varió el índice de conmutación para estudiar la posible aparición de un efecto de *chattering* exagerado en el actuador como función del índice de optimalidad. Los resultados se muestran en la Tabla 6.7. Como se aprecia el tiempo de conmutación es suficientemente lento (> 8 min), aún para altos índices de optimalidad. Esto sugiere que es posible utilizar actuadores estándar, de grado industrial, sin problemas prácticos de *chattering*.

Tabla 6.7. Tiempo de conmutación para el actuador *bang-bang*

P	I_r [%]	Ciclos de Q (<i>bang-bang</i>) totales	Tiempo de conmutación [min]
0.998	99.9	448	8.4
0.98	99.8	151	24.6
0.96	99.2	106	35.4
0.90	96.0	62	60.0

6.3. Evaluación de las aplicaciones

En las aplicaciones presentadas se comprobó el cumplimiento de los siete retos (Introducción, pág 19). En el caso del tratamiento de aguas residuales (TAR) mediante experimentos y en el caso de producción de biomasa mediante simulaciones. El primer caso (TAR) dio origen también a una solicitud de patente ante el Instituto Mexicano de la Propiedad Industrial (Moreno *et al.*, 2004) y a una publicación internacional indexada (Moreno-Andrade *et al.*, en prensa 2005). Los resultados del segundo caso, que fueron presentados en Betancure *et al.* (2004b), muestran la superioridad de la propuesta *ED-TOC* sobre una alternativa teórica del estado del arte.

CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó un control capaz de aproximar la trayectoria óptima nominal, en el sentido de tiempo mínimo, de una clase de biorreactores discontinuos. Se denominó Control de Tiempo Óptimo Robusto dirigido por Eventos (**ED-TOC** del inglés *Event Driven Time Optimal Control*). La característica problemática de la clase de procesos considerada proviene de la forma no monotónica que exhibe el coeficiente específico del crecimiento de la biomasa (μ) cuando el sustrato a procesar tiene efectos inhibitorios en ella.

Como conclusión general se reporta que fue posible solventar los siete retos planteados en el trabajo (ver Introducción, pág. 19). Se presentan a continuación algunas conclusiones particulares.

Conclusiones del aspecto teórico

- 1) Se mostraron las condiciones nominales que ha de cumplir una función (γ) de μ para ser usada en un estimador de eventos por *software*. Los eventos así generados dirigen el **ED-TOC** para realizar un control *bang-bang* (**ON/OFF**) del flujo de alimentación al reactor (Q) de modo que los dos arcos *bang-bang* de la trayectoria óptima nominal sean realizados exactamente y que el arco singular de la misma pueda ser aproximado tan bien como se desee. Esto quiere decir que el **ED-TOC** nominal es practi-óptimo *i.e.* que es sub-óptimo pero que puede hacerse tan cercano como se desee al control óptimo de tiempo mínimo.
- 2) Se relacionó claramente el sentido físico de la variable de control (γ) en cada clase de bioproceso considerado p.ej. la **tasa másica de consumo de oxígeno** (**OMUR** del inglés *Oxygen Mass Uptake Rate*) en procesos aerobios y la **producción gaseosa** en procesos anaerobios. Se mostró la manera de computar aproximaciones prácticas (γ) de dichas variables usando exclusivamente la información y sensores disponibles para cada clase de proceso estudiado.
- 3) Se definieron dos índices de optimalidad, relacionados uno con el tiempo mínimo de proceso (I_t) y otro con la cercanía de la aproximación del arco singular al caso no-

minal (I_{μ}), y se estableció un criterio de practi-óptimalidad que acota a este último por debajo (p_{sng}).

- 4) Se estableció la metodología para considerar la discrepancia entre $\underline{\gamma}$ y γ como una perturbación, misma que puede usarse también en el caso de procesos degradadores de sustrato para analizar simultáneamente otro tipo de perturbaciones y ruidos, de manera que se puedan saber los valores máximos alcanzables de la cota de practi-optimalidad (p_{sng}) para unas condiciones dadas del diseño del bioproceso.
- 5) Se mostró que, en ausencia de otras perturbaciones diferentes al crecimiento de biomasa, siempre es posible rediseñar el bioproceso (p.ej. B_0 y Q_{max}) de modo que la practi-optimalidad pueda ser escogida arbitrariamente cercana a la optimalidad.
- 6) Se mostró la robustez total del *ED-TOC* nominal contra perturbaciones en la concentración de tóxico en el influente y también contra incertidumbre en los parámetros biológicos del reactor, precisamente aquellos que se consideran más inciertos.

Conclusiones del aspecto práctico

- 1) Para unas condiciones estándar de diseño del bioproceso dadas, se mostró cómo calcular la cota mínima alcanzable del índice de optimalidad (p_{sng}).
- 2) Se propuso una función robustificadora que permite, con total seguridad, ignorar lapsos de tiempo de la trayectoria del proceso, aquellos en los cuales los fenómenos no modelizados relacionados con constantes de tiempo y retardo de sensores y actuadores podrían llegar a afectar la robustez del *ED-TOC*.
- 3) La sencillez de la metodología propuesta para sintonizar el *ED-TOC* y su robustez lo hacen un candidato atractivo para aplicarlo industrialmente. En especial le favorece el hecho de no depender de los parámetros altamente variables, sino de la estructura misma del modelo, la cual es robusta por provenir de un balance de masas.

Conclusiones de la aplicación experimental

Se realizó una aplicación experimental a nivel de laboratorio, y también (parcialmente) a nivel de campo, en el tratamiento de agua residual tóxica sintética cuyo com-

puesto modelo fue el 4-clorofenol (4CF). Se comparó el *ED-TOC* contra la estrategia convencional del lote con secuencia de tiempos fijos (*FTC*) y:

- 1) Se comprobó su robustez con el total rechazo a las perturbaciones causadas por picos de carga *i.e.* aumentos de la concentración del tóxico en el influente. Esta cualidad resultó especialmente importante para altos valores de la perturbación donde el *FTC* tradicional pone en peligro, o pierde, la viabilidad de la biomasa.
- 2) Se comprobó su practi-optimalidad, la cual se sostuvo incluso durante las perturbaciones de picos de carga. Se lograron reducciones cercanas al 50% en el tiempo de duración de cada tanda tanto en condiciones estándar como perturbadas.
- 3) Se comprobó que la practi-optimalidad temporal mejora también otros aspectos potenciales de optimalidad: 1) Se aumentó la carga aplicable al reactor entre un 63% y 90%. 2) Se ahorró en aeración entre el 25% y el 39%. 3) Se ahorró, de la energía necesaria para agitación, entre el 25% y el 39%.
- 4) Se comprobó que permite detectar robustamente el final de la reacción y que en todos los casos logró una remoción del tóxico tratado superior al 99%.
- 5) Se comprobó su repetibilidad mediante pruebas estándar de largo plazo.

Conclusiones de la aplicación simulada

Se realizó una aplicación simulada para un caso de producción de biomasa tomado de la literatura reciente. Se comparó el desempeño del *ED-TOC* con el de una propuesta denominada Búsqueda Adaptativa del Extremo (**AES** del inglés *Adaptive Extremum Seeking*) y:

- 1) Se comprobó su aplicabilidad a casos donde el crecimiento de la biomasa es considerable durante cada tanda ($B_f = 270B_0$).
- 2) Se obtuvieron iguales o mejores desempeños del índice de optimalidad (I_t) ante diversos escenarios de incertidumbres y/o perturbaciones del modelo nominal.
- 3) A diferencia del *AES*, no fue necesario ni medir la concentración de sustrato (S) en el reactor ni preocuparse por lograr una fina sintonía del mecanismo de adaptación.

Potencial de futuros trabajos

De manera subjetiva y con base en lo aprendido en este proyecto se proponen como de interés las siguientes líneas de trabajo:

- 1) Continuar la aplicación experimental del caso TAR usando ya AR industriales reales.
- 2) Estudiar mecanismos adaptativos para el valor máximo del flujo (Q_{max}).
- 3) Estudiar la regulación del flujo de aire en el caso TAR con el fin de optimizar, aún más, el consumo energético invertido en aeración. El objetivo adicional propuesto es mantener la concentración del oxígeno en la cota mínima que los expertos consideren aceptable para un adecuado metabolismo de la biomasa.
- 4) Una vez dominado el objetivo de regulación del oxígeno (apartado precedente), estudiar el potencial de automatización del proceso de aclimatación de la biomasa usando el cálculo del *OMUR* a modo de indicador del cumplimiento de la meta del proceso en un control de tiempos variables y eficiencias fijas (*VTC*). En una segunda fase estudiar la aplicación del *ED-TOC* directamente para la aclimatación.
- 5) Realizar una aplicación experimental en un caso de Producción de Biomasa. En este caso es de interés desarrollar la idea del uso sinérgico de observadores del crecimiento de biomasa propuesto en la sub-sección 5.1.3 (pág. 120).
- 6) Estudiar la aplicabilidad del *ED-TOC* en problemas de otros dominios.

ANEXO 1: Listado de ponencias en congresos

- Betancur MJ, Moreno J, Buitrón G. 2002. Modelo refinado de un bio-reactor aerobio. *Memorias del (IFAC) Congreso Latinoamericano de Control Automático*, CLCA 2002, Guadalajara, Jal., México, 4-6 Diciembre 2002. CD, Paper: 120_Betancur.pdf
- Betancur MJ, Moreno J, Buitrón G. 2002. Bio-Reactor Virtual Para el Tratamiento de Aguas Residuales Industriales, *Memorias del XIII Congreso Nacional de la Federación Mexicana de Ingeniería Sanitaria y Ciencias Ambientales*, Guanajuato, Gto., 17-20/04/2002, FEMISCA, Tomo I, 45-51
- Betancur MJ, Moreno JA, Buitrón G. 2004. Event-driven control for treating toxicants in aerobic sequencing batch bioreactors. *Proc. of the 9th Int. Symposium on Computer Appl. in Biotechnology (CAB9)*, CDRom file 1074, 28-31 March 2004. Nancy, France.
- Betancur MJ, Moreno JA, Buitrón G. 2004. Practical Optimal Control for Fed-Batch Bioreactors. *Preprints of NOLCOS 2004 (Nonlinear Control Applications)*, Sep 2004, pp 1517-1522, Stuttgart, Germany
- Betancur MJ, Moreno JA, Buitrón G, Moreno-Andrade I. 2004. Control y mejoras en bioreactores para tratar aguas residuales tóxicas. *Memorias del Congreso Anual de la AMCA*, Octubre 2004, D.F., México, pp. 490-495.
- Betancur MJ, Moreno JA, Moreno-Andrade I, Buitrón G. 2005. Control strategies for treating toxic wastewater using bioreactors. *16th IFAC World Cong.* Jul 2005, Praga.
- Betancur MJ, Moreno-Andrade I, Moreno JA, Dochain D, Buitrón G. 2005. Modeling for the optimal biodegradation of toxic wastewater in a discontinuous reactor. 4th IWA Activated Sludge Population Dynamics Specialist Conference -Microbial Population Dynamics in Biological WWT (ASPD4). 17-20 July 2005, Gold Coast, Australia.
- Betancur MJ, Titica M, Moreno J, Dochain D, Guay M. 2004. Event Software Sensor and Adaptive Extremum Seeking alternatives for optimizing a class of fed-batch bioreactors. *Proceedings of DYCOPS 7*, Cambridge, Massachusetts, USA.

- Buitrón G, Moreno JA, Betancur MJ, Moreno-Andrade I. (2004). Aerobic treatment of toxic wastewater: problems, solutions, and open questions. *Proceedings of the 3rd IWA Specialised Conference on Sequencing Batch Reactor Technology-SBR3*, 22-26 February 2004, Noosa, Australia
- Buitrón G, Moreno-Andrade I, Betancur MJ, Moreno JA. 2004. Biodegradación de efluentes altamente contaminados por compuestos fenólicos utilizando una estrategia de control óptima. *Memorias del XIV Congreso de Ingeniería Ambiental y Ciencias Ambientales*. 12-14/05/2004, Mazatlán, México.
- Buitrón G, Moreno-Andrade I, Betancur MJ, Moreno JA. 2004. Application of the event-driven time optimal control strategy for the degradation of inhibitory wastewater in a discontinuous bioreactor. *Proceedings in CD of the 4th World Water Congress, IWA*. 19-24/09/2004. Marrakech, Morocco, Paper ID 28156.
- Moreno JA, Betancur MJ, Buitrón G. 2003. Practical Event-Driven Robust Sub-Optimal Control for Treating Toxics in Aerobic Sequencing Batch Bioreactors. *Memorias V congreso ACA (Asociación Colombiana de Automática)*, Medellín, Colombia, Julio 17-19 2003
- Moreno J, Betancur M, Buitrón G. 2003. Refinement of an aerobic bioreactor model. *Proceedings of the 4th IMACS Symposium on Mathematical Modelling - 4th MATHMOD*, Vienna, Austria, 5-7 Febrero 2003. pp. 1599-1606. (CD, Paper: 482...Moreno.pdf)
- Moreno-Andrade I, Jiménez L, Pérez J, Betancur MJ, Moreno JA, Vargas A, Buitrón G. 2005. Degradation of a mixture of municipal wastewater and phenol in an aerobic optimally controlled SBR. *3rd IWA Leading-Edge Conference & Exhibition on Water and Wastewater Treatment Technologies (LET 2005)*, 6 - 8 Jun 2005, Sapporo, Japan.
- Moreno-Andrade I, Pérez J, Betancur MJ, Moreno JA, Buitrón G. 2005. Biodegradation of high 4-chlorophenol concentrations in a discontinuous reactor fed with an optimally controlled influent flow rate. *Sustainable Development of Chemical Industries*, 14-16/ Jul/2005. Tsukuba & Kashima, Japan.

ANEXO 2: Parámetros de varios candidatos al modelo EOLI 1 (EM1)

La siguiente tabla resume la identificación reportada en Betancur (2004) para diversos candidatos de modelo del caso PTAR

Candidato / Resultados		b	$K_L a$	k_2/k_1	k_1	k_2	$\mu_0 = \mu_0^5$	K_I	K_S	K_0	$\mu^* = \mu^6$	$S^* = S_e$	S_m	S_t
EM1-A1	Confidence Interval 95%	0.0004	0.1	0.0714		0.2643	0.1075	5.4292	41.2296	0.0631	0.0009	1.9653	1.5915	
	Confidence/Mean ratio	7%	1%	16%		16%	77%	84%	106%	49%	4%	14%	3%	
	Mean Value	0.0059	16.8	0.4585	3.7	1.6963	0.13915	6.43745	38.8812	0.1283	0.0219	13.821	58.442	0
EM1-A2	Confidence Interval 95%	0.0004	0.1	0.0714	0.1275	0.1722	0.05233	0.91687	13.426	0.0051	0.0048	0.1581	0.3867	
	Confidence/Mean ratio	7%	1%	16%	8%	24%	12%	23%	25%	5%	9%	1%	1%	
	Mean Value	0.0059	16.8	0.4585	1.593	0.7327	0.4275	3.9491	52.8808	0.1093	0.0514	14.339	57.746	0
EM1-A3	Confidence Interval 95%	0.0004	0.1			0.0578	0.00255	0.00755	0.01499	0.0038	0.0002	0.017	0.0714	
	Confidence/Mean ratio	7%	1%			6%	1%	0%	0%	4%	1%	0%	0%	
	Mean Value	0.0059	16.8		3.7	1.0363	0.1916	3.75305	60.0076	0.1021	0.0213	15.007	60.03	0
EM1-B1	Confidence Interval 95%	0.0004	0.1	0.0714		0.2643	0.01784	1.01075	8.46744	0.0919	0.0008	0.7886	1.875	
	Confidence/Mean ratio	7%	1%	16%		16%	15%	17%	28%	107%	4%	6%	3%	
	Mean Value	0.0059	16.8	0.4585	3.7	1.6963	0.1197	6.1161	30.1745	0.0862	0.022	13.497	56.901	0
EM1-B2	Confidence Interval 95%	0.0004	0.1	0.0714	0.1275	0.1722	0.04087	0.00706	0.0391	0.0208	0.0045	0.0192	0.0792	
	Confidence/Mean ratio	7%	1%	16%	8%	24%	9%	0%	0%	24%	9%	0%	0%	
	Mean Value	0.0059	16.8	0.4585	1.593	0.7327	0.46225	3.598	59.8005	0.0872	0.0505	14.668	58.6	0
EM1-B3	Confidence Interval 95%	0.0004	0.1			0.177	0.09565	2.27003	31.4181	0.1065	0.0005	1.2448	2.2331	
	Confidence/Mean ratio	7%	1%			14%	54%	55%	73%	159%	2%	10%	4%	
	Mean Value	0.0059	16.8		3.7	1.2718	0.1777	4.1116	43.1102	0.0671	0.0231	12.581	51.351	0
EM1-BC3	Confidence Interval 95%	0.0015	0.24			0.2766	0.08851	44.2531	26.349	0.0583	0.0027	1.0368	48.186	3.446
	Confidence/Mean ratio	32%	1%			26%	82%	103%	116%	79%	11%	8%	51%	114%
	Mean Value	0.0046	16.6		3.7	1.0641	0.10753	42.8947	22.772	0.0733	0.0254	13.287	93.776	3.012
EM1-C3	Confidence Interval 95%	0.0002				0.3106	0.00421	13.7396	0.76478	0.0934	0.0014	1.0373	9.9086	1.237
	Confidence/Mean ratio	6%				36%	11%	17%	31%	117%	5%	7%	7%	21%
	Mean Value	0.0033	16.4		3.7	0.8565	0.03735	81.6779	2.4339	0.0796	0.0277	13.992	136.2	6.025
EM1-D3	Confidence Interval 95%	0.0002				0.3	0.00118	5.99573	0.29703	0.0465	0.0017	0.6857	3.4015	
	Confidence/Mean ratio	6%				35%	3%	6%	17%	31%	6%	5%	2%	
	Mean Value	0.0033	16.4		3.7	0.8684	0.0343	95.3118	1.76295	0.1505	0.027	12.94	145.92	0

⁵ Los parámetros-K (μ_0 , K_I , K_S) se incluyen únicamente como referencia pues su valor medio no representa la media experimental (Betancur, 2004).

⁶ Los parámetros-S (μ^* , S_e , S_m , S_t) fueron los utilizados para los cómputos de cada candidato EM1.

ANEXO 3: Modelo del sensor de oxígeno disuelto

El detalle del procedimiento de modelado para el sensor de oxígeno empleado en el SBR del laboratorio y en la planta piloto se reporta en Betancur (2004). A continuación un resumen:

El experimento consistió en disponer de dos vasos con agua, uno saturado en su concentración de oxígeno, el otro depletado mediante un aditivo químico. El sensor se traspasa rápidamente de un vaso al otro y luego se esperó a que se estabilizará su lectura, momento en el cual se regresó al vaso original y se esperó nuevamente a la estabilización. Un tercer vaso para enjuague con agua limpia se utilizó durante la operación de cambio de vaso.

El sensor fue uno de referencia COS4 de marca Endress+Hausser. Los datos fueron capturados automáticamente por la computadora con un período de muestreo de 0.005h (18 segundos).

Los datos se ajustaron a un modelo de segundo orden como el descrito en las ecuaciones

$$\dot{O}_a = (O_{real} - O_a) / \tau_a$$
$$\dot{O}_{sensor} = (O_{sensor} - O_a) / \tau_b$$

y el resultado de la identificación fue $\tau_a = 0.01h$ y $\tau_b = 0.02h$.

REFERENCIAS

- AFNOR (Association Française de Normalisation). 1985. Evaluation en milieu aqueux de la biodégradabilité aérobie «ultime » des produits organiques solubles. *Normalisation française*. NFT 90-312.
- Andrews JF. 1968. A Mathematical Model for the Continuous Culture of Microorganisms Utilizing Inhibiting Substrates. *Biotechnol Bioeng* 10:707-723.
- APHA (American Public Health Association), American Water Works Association, Water Environment Federation. 1992. *Standard Methods for Examination of Water and Wastewater*, 18th Ed.; Greenberg AE, Clesceri AE, Eaton AD Eds. APHA: Washington D.C.
- Ariyur KB, Krstic M. 2003. *Real-Time Optimization by Extremum-Seeking Control*. John Wiley & Sons, Inc., New Jersey, 2003, ISBN 0471468592, 236p.
- Bastin G, Dochain D. 1990. *On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactors*. Elsevier. Amsterdam.
- Betancur MJ. 2004. WP2 Model selection and parameter identification : EOLI Model 1 candidates BC3, C· and D3 ; *Efficient Operation of Urban Wastewater Treatment Plants (EOLI) reports*, Oct 2004.
- Betancur MJ, Moreno JA, Buitrón G. 2004a. Event-driven control for treating toxicants in aerobic sequencing batch bioreactors. *Proceedings of the 9th International Symposium on Computer Applications in Biotechnology (CAB9)*, CDROM file 1074, 28-31 March 2004. Nancy, France.
- Betancur MJ, Moreno JA, Moreno-Andrade I, Buitrón G. 2005a (en prensa). Practical optimal control of fed-batch bioreactors for the wastewater treatment. *International Journal of Robust and Nonlinear Control*, Special Issue on "Control of (Bio)Chemical Reacting Systems".

- Betancur MJ, Moreno-Andrade I, Moreno JA, Dochain D, Buitrón G. 2005b. Modeling for the optimal biodegradation of toxic wastewater in a discontinuous reactor. *4th IWA Activated Sludge Population Dynamics Specialist Conference - Microbial Population Dynamics in Biological Wastewater Treatment (ASPD4)*. 17-20 July 2005, Gold Coast, Australia.
- Betancur MJ, Titica M, Moreno J, Dochain D, Guay M. 2004b. Event Software Sensor and Adaptive Extremum Seeking alternatives for optimizing a class of fed-batch bioreactors. *Proceedings of DYCOPS 7*, Cambridge, Massachusetts, USA.
- Biowise. 2004. Networked Biosensors for Protecting Biological Remediation Populations and Discharge Consents (Sense-net). *Biotechnology at Work (BIO-WISE)*. UK department of trade and industry (DTI) Technology Program. [en línea, Abril 2005, <http://www.dti.gov.uk/biowise>].
- Buitrón G, Moreno J. 2002. Modeling of the acclimation/deacclimation process of a mixed culture degrading 4-chlorophenol, *Proceedings of the 5th IWA Chemical Industry Group Conference*, Nimes, France, 179-186.
- Buitrón G, Schoeb ME, Moreno J. 2003. Automated Sequencing Batch Bioreactor under Extreme Peaks of 4-Chlorophenol. *Water Sci Technol* 47(10):175-181.
- Buitrón G, Moreno JA, Betancur MJ, Moreno I. 2004. Aerobic treatment of toxic wastewater: problems, solutions, and open questions. *Proceedings of the 3rd IWA Specialised Conference on Sequencing Batch Reactor Technology-SBR3*, 22-26 February 2004, Noosa, Australia.
- Buitrón G, Schoeb ME, Moreno-Andrade I, Moreno J. 2005. Comparison of two Control Strategies for an Automated Sequencing Batch Reactor under Extreme Peaks of 4-Chlorophenol. *Water Res* 39(6):1015-1024.

- Chang DM (2003). The snowball Effect in Fed-Batch Bioreactions, *Biotechnol Prog* 19:1064-1070.
- Chaudhuri B, Modak JM. 1997. *Optimization of fed-batch bioreactors using Neural Net Model*. [en línea, Abril 2005, <http://www.eprints.iisc.ernet.in>].
- Chen J, Rulkens WH, Bruning H. 1997. Photochemical elimination of phenols and COD in industrial wastewaters. *Water Sci Technol* 35(4):231–238.
- Coello-Oviedo MD, López-Ramírez JA, Sales D, Quiroga JM. 2003. Evolution of an activated sludge system under starvation conditions. *J Chem Eng* 94:139-146.
- Dochain D, Vanrolleghem PA. 2001. *Dynamical Modelling and Estimation in Wastewater Treatment Processes*. IWA Publishing. London.
- Eichner CA, Erb RW, Timmis KN, Wagner-Dobler I. 1999. Thermal Gradient Gel electrophoresis analysis of Bioprotection from Pollutant shocks in the Activated Sludge Microbial Community. *Applied and Environmental Microbiology*. Jan 1999:102-109.
- Ellis TG, Smets BF, Bagnamua BS Jr, Leslie-Grady CP Jr. 1996. Changes in measured biodegradation kinetics during the long term operation of Completely Mixed Activated Sludge (CMAS) bioreactors. *Wat Sci Tech* 34:35-42.
- EOLI. 2005. *Efficient Operation of Urban Waste Water Treatment Plants*. [En línea, Agosto 24 de 2005, <http://www.auto.ucl.ac.be/EOLI>].
- Galil NI, Schwartz-Mittelman A, Saroussi-Zohar O. 1998. Biomass Deflocculation and Process disturbances exerted by Phenol induced transient load condition, *Wat Sci Tech* 38:105-112.
- Gupta VK, Saurab Sharma IS, Mohan Y&D. 1998. Utilization of Bagasse Fly Ash Generated in the Sugar Industry for the Removal and Recovery of Phenol and p-NitroPhenol from Wastewater. *J Chem Technol Biotechnol* 71:180-186.

- Hermes H, LaSalle JP. 1969. *Functional analysis and time optimal control*. Acad Press. NY.
- Ingildsen P. 2002. *Realising Full-scale Control in Wastewater Treatment Systems Using In Situ Nutrient Sensors* (Doctoral Dissertation), Media-Trick Lund University, Lund 2002, ISBN 91-88934-22-5, 351 p.
- Marcos N, Guay M, Dochain D, Zhang T. 2004. Adaptive Extremum-Seeking control of a continuous bioreactor. *J Process Contr* 14(3):317-328.
- Modak JM, Lim HC, Tayeb YJ. 1986. General characteristics of optimal feed rate profiles for various fed-batch fermentation processes. *Biotechnol Bioeng* 28:1396-1407.
- Moreno J. 1999. Optimal time control of bioreactors for the wastewater treatment. *Optim Contr Appl Met* 20:145-164.
- Moreno JA, Betancur MJ, Buitrón G, Moreno-Andrade I. 2005 (aceptado). Event-Driven Time-Optimal Control for a Class of Discontinuos Bioreactors. *Biotech Bioeng*.
- Moreno JA, Buitrón G, Betancur MJ. 2005 (pendiente). *Proceso para operar un Reactor Aerobio*. Solicitud de Patente Mexicana: Expediente IMPI PA/a/2005/001368, Feb 2005, Folio PA/E/2005/006962.
- Moreno-Andrade I, Buitrón G, Betancur MJ, Moreno JA. 2005 (en prensa). Optimal Degradation of Inhibitory Wastewaters in a Fed-batch Reactor. *J Chem Tech Biotech*.
- Olguin-Lora P, Puig-Grajales I, Razo-Flores E. 2003. Inhibition of the acetoclastic methanogenic activity by phenol and alkyl phenols. *Environ Technol* 24:999-1006.
- Olguín-Lora P, Razo-Flores E. 2004. Anaerobic biodegradation of phenol in sulfide-rich media. *J Chem Technol Biotechnol* 79:554-561.

- Olmos A, Olguín P, Fajardo C, Razo E, Monroy O. 2004. Physicochemical Characterization of Spent Caustic from the OXIMER Process and Sour Waters from Mexican Oil Refineries. *Energy & Fuels* 18:302-304.
- Pörtner R, Schwabe JO, Frahm B. 2004. Evaluation of Selected control strategies for fed-batch cultures of a Hibrodoma cell line, *Biotechnol Appl Biochem* 40:47-55.
- Ronen M, Shabtai Y, Guterman H. 2002. Optimization of feeding profile for a fed-batch bioreactor by an evolutionary algorithm, *J of Biotechnol* 97:253-263.
- Sarkar D, Modak JM. 2003. Optimisation of fed-batch bioreactors using genetic algorithms. *Chem Eng Sci* 58:2283-2296.
- Smets IYM, Versyck KJE, Van Impe JFM. 2002. Optimal control theory: a generic tool for identification and control of (bio-)chemical reactors. *Annual Reviews in Control* 26:57-73.
- Srinivasan B, Bonvin D, Visser E, Palanki S. 2002. Dynamic Optimization of Batch Processes. II. Role of measurements in handling uncertainty. *Computers and Chemical Engineering* 27:27-44
- Tay JH, Moy BYP, Jiang HL, Tay STL. 2004. Aerobically Grown Microbial Granules cultivated for WW treatment show High Resilience to Toxic Shocks, *Civil engineering research*, Jan-2004:55-56
- Titica M, Dochain D, Guay M. 2003. Adaptive Extremum-Seeking Control of Fed-Batch Bio-reactors. *Eur J Control* 9:614-627.
- Van Impe JFM, Bastin G. 1995. Optimal adaptive control of fed-batch fermentation processes. *Control Eng Pract* 3(7):939-954.

-
- Van Impe JFM. 1998. Optimal control of fed-batch fermentation processes. *In: Advanced Instrumentation, Data Interpretation, and Control of Biotechnological Processes* 319-346. Kluwer Acad Pub. Dordrecht-Boston-London.
- Vargas A. 1999. *Control de tiempo óptimo de un biorreactor aerobio usando observadores no lineales*. Tesis de Maestría UNAM. pp81.
- Vargas A, Soto G, Moreno J, Buitrón G. 2000. Observer based time-optimal control of an aerobic SBR for chemical and petrochemical wastewater treatment. *Water Sci Technol* 42(5-6):163-170.
- Watanabe K, Hino S, Takahashi N. 1996. Responses of activated sludge to an increase in phenol loading. *J Ferment Bioeng* 82:522-524.
- Watanabe K, Yamamoto S, Hino S, Harayama S. 1998. Population Dynamics of Phenol-degrading bacteria in activated Sludge determined by *gyr-B* targeted Quantitative PCR. *Applied and Environmental Microbiology* Apr-1998:1203-1209.
- Wilderer PA, Irvine RL, Goronszy MC. 2001. Sequencing Batch Reactor Technology. *Scientific and Technical Report Series No. 10*, IWA publishing, London, pp10