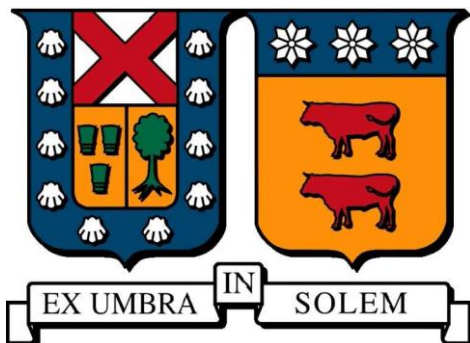


UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y AMBIENTAL
SANTIAGO-CHILE



**“ESTIMACIÓN DE PERTURBACIONES PARA SU INCORPORACIÓN
EN LA OPTIMIZACIÓN EN TIEMPO REAL EN SISTEMAS DE
SUPERVISIÓN DE PROCESOS”**

FÉLIX ALEJANDRO GONZÁLEZ PASMIÑO

**TESIS DE TITULACIÓN PARA OPTAR AL GRADO DE
INGENIERO CIVIL QUÍMICO**

PROFESOR GUÍA: DR. DANIEL NAVIA LÓPEZ
PROFESOR CORREFERENTE: M.SC. PAULINA QUINTANILLA

AGOSTO 2018

Agradecimientos

Agradecer al proyecto Fondecyt de Iniciación 11160203 por el apoyo económico en la realización de esta memoria.

Agradecer a mi padre y a mi madre, Félix y Adelaida, por todas las enseñanzas que me han dado a lo largo de los años y que sin su constante apoyo y animo este trabajo no sería posible.

A mi hermana Valentina, por siempre alegrarme en mis momentos tristes y ser un constante apoyo durante todos estos años. Espero que nuestra hermandad dure para toda la vida.

A mi tío Claudio y a mi Ita, por su constante apoyo, cariño y palabras de aliento para superarme.

A mis amigos de la villa y de mi vida, Marcelo, Bastián, Álvaro y Bruno, por alegrarme los días luego de duras jornadas de estudio y siempre comprender cuando más de una vez les dije que no.

A mi polola Constanza, que desde el inicio me ha dado su cariño incondicional, apoyándome a lo largo de toda mi estadía en la universidad.

A mis amigos de la universidad Javier, Cristóbal, Carla, Víctor, Felipe y Naira, porque la amistad que se ha forjado durante el último tiempo perdure para toda la vida.

A mis compañeros de generación por todos esos trabajos, actividades, jornadas y partidos en conjunto que alguna vez tuvimos.

Al profesor Daniel Navia por permitirme trabajar con él, por su constante apoyo y consejos brindados durante el desarrollo de este trabajo y las anécdotas compartidas.

A Paulina Quintanilla por su ayuda y guía en el desarrollo de este trabajo.

A los profesores y apoyos académicos del departamento de Ingeniería Química y Ambiental del campus San Joaquín, por su guía y enseñanzas en mi trabajo como ayudante.

A la Universidad Técnica Federico Santa María y al departamento de Ingeniería Química y Ambiental darme la posibilidad de formarme como profesional y por permitirme desarrollar este trabajo.

Agradecer a cada una de las personas que conocí a lo largo de mis años en la universidad, cada una de ellas aportó su grano de arena para lograr que llegara al final de esta hermosa carrera que es la Ingeniería Química.

A mi padre. madre y hermana

Resumen

La optimización en tiempo real (RTO) es una metodología sistemática e iterativa que busca las condiciones óptimas de un proceso, a pesar de la presencia de incertidumbres en el modelo que lo describe. Las perturbaciones pueden afectar el desempeño de esta metodología debido al cambio que estas generan en las condiciones del sistema, por lo que es necesario incluir información de éstas en la RTO.

El presente trabajo tiene como objetivo general estudiar e implementar metodologías de estimación de perturbaciones para su incorporación en optimización en tiempo real con adaptación de modificadores. Para esto se utilizará el modelo del Reactor de Otto Williams como sistema experimental, al cual se le realizarán cambios en el flujo de alimentación de uno de sus componentes, asumiendo que este cambio no puede ser medido. La optimización en tiempo real con adaptación de modificadores permite llegar al óptimo del proceso aún en presencia de incertidumbre estructural, ya que ocupa un sistema de aprendizaje automático basado en el cálculo de los gradientes del proceso, utilizando información pasada del sistema. Debido a que esta metodología está basada en información pasada, la presencia de perturbaciones afecta directamente a la estimación de los gradientes del proceso, puesto que, al generar un cambio en las condiciones del sistema, es necesario evaluar qué parte del cambio observado en las variables dependientes es producto de las perturbaciones y qué parte se explica por modificaciones en las variables de decisión. Puesto que las perturbaciones no siempre son medidas, esto podría comprometer la efectividad de los modificadores a la hora de alcanzar el óptimo del proceso. Para el estudio de estimadores de perturbación y cómo afectan éstos al rendimiento de la RTO al Reactor de Otto Williams, se añadieron perturbaciones de dos formas: Una en escalón con una tendencia definida y tasa de cambio constante; y otra generada con una función ARIMA, la cual permite tener un acercamiento más real a las perturbaciones al agregar autocorrelación y aleatoriedad a estas. Las estimaciones realizadas son utilizadas para mejorar el cálculo de los gradientes del proceso mediante la definición de derivadas direccionales y el valor obtenido de la perturbación es utilizado en el modelo.

Para la estimación de las perturbaciones se utilizan 3 propuestas distintas de mínimos cuadrados: La primera utiliza las diferencias entre las mediciones del proceso y el modelo para obtener el valor del flujo de A (LS), la segunda utiliza la misma información que la anterior pero adicionalmente ajusta los parámetros del modelo (LS+COV) y la tercera utiliza la función *Fair* como función objetivo (FAIR). También se utilizan 2 propuestas de Filtro de Kalman Extendido: La primera utiliza mediciones tomadas del transiente del proceso (HEKF) y la segunda solo utiliza mediciones en el estado estacionario (SSKF).

Los resultados obtenidos muestran que todos los estimadores utilizados mejoran el desempeño de la RTO cuando las perturbaciones son realizadas en forma escalón y con una frecuencia de cambio similar a los ciclos de ejecución de RTO, esto se debe a que estimar las perturbaciones permiten incluir su influencia en los cambios provocados en el proceso y así obtener un gradiente más representativo para la obtención de los modificadores utilizados en la metodología Dual. Para el mismo tipo de perturbación con una frecuencia de cambio superior a la RTO, se obtienen mejores resultados sin la inclusión de estimadores.

Esto se debería a que los estimadores no entregan valores fijos durante el periodo que la perturbación se mantiene constante, asignándole influencia en el proceso a una variable que no ha cambiado, y por lo tanto la aproximación de los gradientes no es la correcta.

Para las perturbaciones generadas con la función ARIMA, la metodología de adaptación de modificadores Dual obtiene mejores resultados sin la incorporación de los estimadores de perturbación para casos bajo 5 ciclos de RTO. Sobre esta frecuencia de cambio, los estimadores benefician el desempeño de la RTO obteniendo mejores resultados el método LS+COV.

El mejor estimador corresponde al Filtro de Kalman Extendido, pero el que beneficia más a la RTO es el método de mínimos cuadrados, utilizando la función objetivo *Fair* para la perturbación con la función escalón, presentando un error del 8% para la obtención de flujo de B, y LS+COV para ARIMA con un error del 13% para la misma variable. Esto ocurre ya que, además de mejorar la estimación de los gradientes, le entregan al modelo un valor de las perturbaciones que permite obtener composiciones similares a las del proceso.

Respecto a las restricciones del proceso, se puede observar que en todos los casos se generan puntos infactibles, lo cual no mejora al incluir los estimadores de perturbación. Esto se debería a que la metodología MA no garantiza una trayectoria factible en su camino hacia el óptimo aun cuando se mejora la estimación de los gradientes.

Finalmente, se realiza una propuesta de sistema experimental a escala laboratorio utilizando los equipos disponibles en el Laboratorio de Optimización de la Universidad técnica Federico Santa María, Campus San Joaquín. Para esto se escalaron los parámetros del proceso con el fin de ajustarse a los rangos operacionales de los equipos disponibles.

Abstract

The Real-Time Optimization (RTO) is a systematic and iterative methodology that seeks the optimal conditions of a process, despite the presence of uncertainties in the model that describes it. Since the disturbances can affect the performance of this methodology, due to the change that these generate in the system conditions, it is necessary to include information in the RTO.

The main objective of this work is to study and implement perturbation estimation methodologies to incorporate them in the Real-Time Optimization with Modifier Adaptation (MA). For this purpose, the Otto Williams Reactor model will be used as an experimental system and, as a disturbance, the feed flow of one of its components will be changed, assuming that this change can not be measured. The RTO with MA allows reaching the optimum of the process, even in the presence of structural uncertainty, since it occupies an automatic learning system based on the calculation of the process gradients, using past measurement from the system. Because of this methodology is based on past information, the presence of disturbances directly affects the estimation of the process gradients, since, when generating a change in the conditions of the system, it is necessary to evaluate which part of the change observed in the dependent variables is a result of the disturbances, and which one is explained by changes in the decision variables. Since disturbances are not always measured, this could compromise the effectiveness of the modifiers in reaching the optimum of the process. For the study of perturbation estimators, and how they affect the performance of the RTO to the Otto Williams Reactor, disturbances were added in two ways: One in step with a definite trend and constant rate of change; and another generated with an ARIMA function, which allows a more realistic approach to disturbances, by adding autocorrelation and randomness. The estimations made are used to improve the calculation of process gradients by defining directional derivatives and the value obtained from the disturbance is used in the model.

For the estimation of the disturbances, 3 different proposals of least squares are used: The first one uses the differences between the measurements of the process and the model to obtain the value of the flow of A (LS), the second one uses the same information as the previous one but, additionally, it adjusts the parameters of the model (LS+COV). The third one uses the function Fair as objective function (FAIR). Two proposals for Extended Kalman Filter are also used: The first one uses measurements taken from the process transient (HEKF), and the second one only uses measurements in the steady state (SSKF).

The results obtained show that all the estimators improved the performance of the RTO when the disturbances are performed in a step function, with a frequency of change similar to the RTO execution cycles. This is explained by estimating the perturbations allow including their influence in the changes caused in the process, and thus, to obtain a more representative gradient to obtain the modifiers used in the Dual methodology. For the same type of disturbance, but with a change frequency higher than the RTO, better results are obtained without the inclusion of estimators. This is because the estimators do not provide fixed values during the period that the disturbance remains constant, assigning influence in the process to a variable that has not changed, and therefore, the approximation of the gradients is not correct.

For perturbations generated with the ARIMA function, the Dual modifier adaptation methodology obtains better results without the incorporation of disturbance estimators for cases under five cycles of RTO. On this frequency change, the estimators benefit the performance of the RTO obtaining better results, using LS+COV methodology.

The best estimator corresponds to the Extended Kalman Filter, but the one that benefits the RTO the most is the square minimum method, using the Fair objective function for a step changes of disturbances, obtaining an error of 8% for flow B. On the other hand, when the disturbances are estimated by ARIMA model, LS+COV presents the better performance, with an error of 13% for the same variable, since, in addition to improving the estimation of the gradients, it gives the model a value of the perturbations that allows obtaining compositions similar to those of the process.

Regarding the process constraints, in all cases, infeasible points are generated, which is not improved by the inclusion of disturbance estimators. This is because the MA methodology does not guarantee a feasible trajectory on the way to the optimum, even though the estimation of the gradients is improved.

Finally, a proposal for an experimental system at laboratory scale is made, using the set up available in the Optimization Laboratory of the Universidad Técnica Federico Santa María, San Joaquín Campus. For this, the parameters of the process were scaled in order to adjust to the operational ranges of the available equipment.

Contenido

1.	Introducción y Objetivos	1
1.1	Objetivos	1
1.1.1	Objetivo general	1
1.1.2	Objetivos específicos	1
2.	Antecedentes generales	2
2.1	Problemas de optimización	2
2.2	Sistema de supervisión de procesos.....	2
2.3	Optimización en tiempo Real (RTO).....	3
2.3.1	Condiciones necesarias de optimalidad	4
2.3.2	RTO de dos etapas	5
2.3.3	Integrated System Optimization Parameter Estimation (ISOPE).....	6
2.3.4	Metodología de adaptación de modificadores.....	7
2.3.5	Adaptación de Modificadores Dual	10
2.3.6	Adaptación de modificadores anidados	11
3.	Perturbaciones.....	13
3.1	Clasificación de perturbaciones.....	13
3.2	Propuesta para el manejo de perturbaciones no medibles.....	14
4.	Estimación de perturbaciones	16
4.1	Mínimos cuadrados.....	16
4.2	Filtro de Kalman Extendido	18
4.3	Nomenclatura utilizada para las propuestas de estimadores de perturbación	21
5.	Metodología experimental	22
5.1	Reactor Otto Williams	22
5.2	Función Objetivo	26
5.3	Restricciones.....	26
5.4	Simulador de perturbaciones	26
6.	Resultados.....	30
6.1	Evaluación de los resultados	30
6.2	Consideraciones en los distintos estimadores de perturbaciones	31
6.3	Implementación de estimadores	31
6.4	Simulación con perturbaciones tipo escalón	33
6.4.1	Cada 1 ciclo de RTO.....	33
6.4.2	Cada 2 ciclos de RTO	41
6.4.3	Cada 3 ciclos de RTO o más	48

6.5	Simulación con perturbaciones tipo ARIMA.....	55
6.5.1	Cada 1 ciclo de RTO.....	56
6.5.2	Cada 2 ciclos de RTO	65
6.5.3	Cada 3 ciclos o más de RTO	74
7.	Propuesta de sistema experimental a escala laboratorio.....	83
7.1	Equipos disponibles	83
7.2	Escalamiento de parámetros.....	86
8.	Conclusiones.....	89
9.	Recomendaciones para trabajos futuros	91
10.	Referencias.....	92
11.	Anexos.....	94
11.1	Anexo A.....	94
11.2	Anexo B.....	95
11.3	Anexo C.....	96
11.4	Anexo D.....	97
11.5	Anexo E.....	97

Índice de figuras

Figura 2.1.	Componentes de la RTO.....	3
Figura 2.2.	Algoritmo de la metodología de 2 etapas.	6
Figura 2.3.	Algoritmo de implementación para metodología de adaptación de modificadores.....	9
Figura 2.4.	Algoritmo de implementación para metodología de adaptación de modificadores anidada.....	12
Figura 5.1.	Esquema del Reactor de Otto Williams.....	22
Figura 5.2.	Porcentaje de cambio en las variables de decisión óptimas.	27
Figura 5.3.	Perturbación tipo escalón para el flujo de A en [kg/s].	28
Figura 5.4	Perturbación generada en el flujo de A utilizando la función ARIMA (1,0,2)	29
Figura 6.1	Algoritmo para MA Dual con etapa de estimación de perturbaciones.	32
Figura 6.2.	Evolución de las variables de decisión (rojo) y las variables de decisión óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo.	33
Figura 6.3.	Evolución del beneficio al aplicar las variables de decisión obtenidas del modelo (rojo) y las variables de decisión óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo.	34
Figura 6.4.	Evolución de las variables fracciones másicas (rojo) y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo.....	35
Figura 6.5.	Comparación del valor estimado para FA [kg/s] obtenido con los distintos estimadores de perturbaciones, cada 1 ciclo de RTO.	36

Figura 6.6. Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.	37
Figura 6.7. Comparación de la variable de decisión 2 (temperatura del Reactor) obtenida al incluir las distintas metodologías de estimación de perturbaciones incluidas cada 1 ciclo de RTO.	37
Figura 6.8. Comparación del beneficio obtenido por las diferentes propuestas al aplicar las variables de decisión obtenidas del modelo (rojo) y las variables de decisión óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo.	38
Figura 6.9. Comparación de la evolución de la fracción másicas de A (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo.	40
Figura 6.10. Comparación de la evolución de la fracción másicas de G (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo.	40
Figura 6.11. Evolución de las variables de decisión (rojo) y las variables de decisión óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclos.	41
Figura 6.12. Evolución del beneficio al aplicar las variables de decisión obtenidas del modelo (rojo) y las variables de decisión óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclo.	42
Figura 6.13. Evolución de las fracciones másicas (rojo) y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclo.	43
Figura 6.14. Comparación de del valor estimado para FA obtenida con los distintos estimadores de perturbaciones, cada 2 ciclo de RTO.	44
Figura 6.15. Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.	45
Figura 6.16. Comparación de la variable de decisión 2 (temperatura del Reactor) obtenida al incluir las distintas metodologías de estimación de perturbaciones incluidas cada 2 ciclo de RTO.	45
Figura 6.17. Comparación del beneficio obtenido por las diferentes propuestas al aplicar las variables de decisión obtenidas del modelo (rojo) y las variables de decisión óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclos.	46
Figura 6.18. Comparación de la evolución de la fracción másicas de A (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclo.	47
Figura 6.19. Comparación de la evolución de la fracción másicas de G (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclo.	48
Figura 6.20. Evolución de la variable de decisión (Flujo de B izquierda y temperatura a la derecha) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclos.	49
Figura 6.21. Evolución de la función objetivo en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclos	49

Figura 6.22. Evolución de las fracciones másicas (rojo) y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclo.	50
Figura 6.23. Comparación de del valor estimado para FA obtenida con los distintos estimadores de perturbaciones para perturbaciones cada 6 ciclos.....	51
Figura 6.24. Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación para perturbaciones cada 6 ciclos. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.	51
Figura 6.25. Comparación de la variable de decisión 2 (temperatura del Reactor) obtenida al incluir las distintas metodologías de estimación de perturbaciones incluidas cada 6 ciclos de RTO.....	52
Figura 6.26. Comparación del beneficio obtenido por las diferentes propuestas al aplicar las variables de decisión obtenidas del modelo (rojo) y las variables de decisión óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclos.	53
Figura 6.27. Comparación de la evolución de la fracción másicas de A (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclo.	54
Figura 6.28. Comparación de la evolución de la fracción másicas de G (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclo.	55
Figura 6.29. Cuatro posibles caminos generados con la función ARIMA (1,0,2). Cada color representa un camino distinto para la misma perturbación.	56
Figura 6.30. Evolución de la variable de decisión 1 (flujo de B) en las distintas realizaciones generadas con la función ARIMA, con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO.	57
Figura 6.31. Evolución de la variable de decisión 2 (Temperatura) en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO.	57
Figura 6.32. Evolución del del beneficio en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO.	58
Figura 6.33. Evolución de las fracciones másicas (rojo) y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo para la realización 1.	59
Figura 6.34. Comparación de del valor estimado para FA obtenida con los distintos estimadores de perturbaciones con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO para la realización 1.	60
Figura 6.35. Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.....	60
Figura 6.36. Comparación de la variable de decisión 2 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.....	61
Figura 6.37. Comparación del beneficio obtenido con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.....	61
Figura 6.38. Comparación de la evolución de la fracción másicas de A (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo para la realización 1.	63

Figura 6.39. Comparación de la evolución de la fracción máscas de G (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva resctricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo para la realización 1.	63
Figura 6.40. Evolución de la variable de decisión 1 (flujo de B) en las distintas realizaciones generadas con la función ARIMA, con perturbaciones cada 2 ciclos de RTO.	66
Figura 6.41. Evolución de la variable de decisión 2 (Temperatura) en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 2 ciclos de RTO.	66
Figura 6.42. Evolución del del beneficio en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 2 ciclo de RTO.	67
Figura 6.43. Evolución de las fracciones máscas (rojo) y su respectiva resctricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclos para la realización 1.	68
Figura 6.44. Comparación de del valor estimado para FA obtenida con los distintos estimadores de perturbaciones con perturbaciones cada 2 ciclo de RTO para la realización 1.	69
Figura 6.45. Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación con perturbaciones cada 2 ciclo de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.....	69
Figura 6.46. Comparación de la variable de decisión 2 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación con perturbaciones cada 2 ciclo de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.....	70
Figura 6.47. Comparación del beneficio obtenido con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación con perturbaciones cada 2 ciclo de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.....	70
Figura 6.48. Comparación de la evolución de la fracción máscas de A (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva resctricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclo para la realización 1.	73
Figura 6.49. Comparación de la evolución de la fracción máscas de G (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva resctricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclo para la realización 1.	73
Figura 6.50. Evolución de la variable de decisión 1 (Flujo de B) en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 6 ciclos de RTO.	74
Figura 6.51. Evolución de la variable de decisión 2 (Temperatura) en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 6 ciclos de RTO.	75
Figura 6.52. Evolución del del beneficio en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 6 ciclo de RTO.	75
Figura 6.53. Evolución de las fracciones máscas (rojo) y su respectiva resctricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclos para la realización 1.	76
Figura 6.54. Comparación de del valor estimado para FA obtenida con los distintos estimadores de perturbaciones con perturbaciones cada 6 ciclos de RTO para la realización 1.....	77
Figura 6.55 Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación. Para la realización 1 con una tasa de cambio de cada 6 iteraciones. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.	78

Figura 6.56. Comparación de la variable de decisión 2 (temperatura del Reactor) obtenida al incluir las distintas metodologías de estimación de perturbaciones incluidas cada 6 ciclos de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.	79
Figura 6.57. Comparación del beneficio obtenido al incluir las distintas metodologías de estimación de perturbaciones incluidas cada 6 ciclos de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.....	79
Figura 6.58. Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación. Para la realización 2 con una tasa de cambio de cada 6 iteraciones. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.	80
Figura 6.59. Comparación de la evolución de la fracción másicas de A (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclo para la realización 1.	82
Figura 6.60. Comparación de la evolución de la fracción másicas de G (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclo para la realización 1.	82
Figura 7.1. Montaje experimental disponible en el Laboratorio de Optimización de la Universidad Técnica Federico Santa María Campus San Joaquín.	84
Figura 7.2. P&ID del Reactor de Otto Williams disponible en el Laboratorio de Optimización de la Universidad Técnica Federico Santa María Campus San Joaquín. En verde se representa la corriente de alimentación y descarga del reactor, en azul la corriente de refrigeración y en rojo la resistencia encargada de la calefacción del reactor.	85
Figura 7.3. Variables de decisión obtenidas en el sistema escalado. En verde presenta el óptimo del proceso y en rojo los óptimos obtenidos con el modelo.	87
Figura 7.4. Beneficio obtenido con el sistema escalado.	88
Figura 11.1. Comparación de del valor estimado para FA obtenida con los distintos estimadores de perturbaciones con perturbaciones cada 6 ciclos de RTO para la realización 2.....	96
Figura 11.2. Comparación de la variable de decisión 2 (temperatura del Reactor) obtenida al incluir las distintas metodologías de estimación de perturbaciones incluidas cada 6 ciclos de RTO para la realización 2-	96

Índice de tablas

Tabla 4.1. Nomenclatura utilizada para referirse a los distintos estimadores de perturbación.	21
Tabla 5.1. Nomenclatura utilizada en el Reactor de Otto Williams	25
Tabla 5.2. Valores de los parámetros utilizados en el Reactor de Otto Williams (Navia, 2013).....	25
Tabla 6.1. Comparación de los errores promedios en la estimación de las perturbaciones y de las variables de decisión.....	39
Tabla 6.2. Comparación de los errores promedios en la estimación de las perturbaciones y de las variables de decisión para perturbaciones cada 6 ciclos de RTO.....	46
Tabla 6.3. Mejores propuestas para la estimación de perturbaciones y obtención de variables de decisión que optimizan el proceso desde 3 hasta 6 ciclos.....	53

Tabla 6.4. Comparación de los errores promedios en la estimación de las perturbaciones y de las variables de decisión para el camino 1	62
Tabla 6.5. Resumen de los errores porcentuales obtenidos en la estimación del flujo de A en los caminos 2, 3 y 4 generados con la función ARIMA, con una perturbación cada 1 ciclo de RTO.....	64
Tabla 6.6 . Resumen de los errores porcentuales obtenidos en la obtención de las variables de decisión en los caminos 2, 3 y 4 generados con la función ARIMA, con una perturbación cada 1 ciclo de RTO.	65
Tabla 6.7. Errores porcentuales en la estimación del valor de FA para los caminos 1 y 2, con una tasa de cambio de 2 ciclos de RTO.	71
Tabla 6.8. Errores porcentuales en la estimación del valor de FA para los caminos 3 y 4, con una tasa de cambio de 2 ciclos de RTO.	71
Tabla 6.9. Errores porcentuales en la obtención de las variables de decisión para los caminos 1 y 2 como una tasa de cambio de 2 a 3 ciclos de RTO.	72
Tabla 6.10. Errores porcentuales en la obtención de las variables de decisión para los caminos 3 y 4 como una tasa de cambio de 2 ciclos de RTO.	72
Tabla 6.11. Errores porcentuales en la estimación del valor de FA para los caminos 1 y 2, con una tasa de cambio de 3 a 6 ciclos de RTO.	77
Tabla 6.12. Errores porcentuales en la estimación del valor de FA para los caminos 3 y 4, con una tasa de cambio de 3 a 6 ciclos de RTO.	78
Tabla 6.13. Errores porcentuales en la estimación de las variables de decisión para la realización 1, con una tasa de cambio de 3 a 6 ciclos de RTO.....	80
Tabla 6.14. Errores porcentuales en la estimación de las variables de decisión para el camino 2, con una tasa de cambio de 3 a 6 ciclos de RTO.	81
Tabla 7.1. Simbología, instrumentos y descripción del montaje experimental disponible en el Laboratorio de Optimización de la Universidad Técnica Federico Santa María Campus San Joaquín	85
Tabla 7.2. Modelo de los equipos disponibles en el Laboratorio de Optimización de la Universidad Técnica Federico Santa María Campus San Joaquín	86
Tabla 7.3. Parámetros escalados obtenidos para el proceso y el modelo.....	87
Tabla 11.1. Resumen de comparación de los errores promedios en la estimación de las perturbaciones y de las variables de decisión de 3 hasta 6 ciclos	95
Tabla 11.2. Valores escalados para el flujo de A y flujo de B	97
Tabla 11.3. Resumen de las características del sistema computacional utilizado.	97

1. Introducción y Objetivos

En la industria es frecuente el uso de sistemas de supervisión de proceso que permitan mejorar su desempeño al minimizar costos, y asegurar el cumplimiento de las restricciones operacionales. La optimización en tiempo real (RTO, por sus siglas en inglés) es una metodología sistemática que busca las condiciones óptimas del sistema a pesar de las incertidumbres, actualizando las consignas de los controladores involucrados. Esto lo logra por medio de la resolución de un problema de optimización basado en un modelo fenomenológico.

Debido a la incertidumbre de los modelos, no es posible representar de manera fiel los fenómenos que gobiernan un sistema, por lo tanto, es necesario modificar el problema de optimización para lograr las condiciones de operación requeridas a través del aprendizaje automático. Una de las metodologías de aprendizaje con que cuenta la RTO es la llamada Adaptación de Modificadores (o MA, por sus siglas en inglés), la cual consiste en la corrección de las condiciones de optimalidad del problema de optimización basado en modelos, para que esta iguale a las del proceso.

Esta metodología puede ser implementada en simulación o a escala laboratorio, presentando resultados exitosos. Sin embargo, no hay información sobre el efecto que las perturbaciones tienen en el desempeño de la RTO. Por lo que estudiar su efecto es importante debido a que estas podrían afectar el aprendizaje de la RTO perjudicando su propiedad de convergencia al óptimo del proceso. Por lo tanto, es fundamental obtener información de las perturbaciones, cómo es su tendencia o valor y, en caso de no contar con medidas, se debe buscar una metodología que permita estimarlas.

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo general

Estudiar e implementar metodologías de estimación de perturbaciones para su incorporación en optimización en tiempo real con adaptación de modificadores.

1.1.2 Objetivos específicos

- Definición de un proceso base para estudiar el efecto de las perturbaciones en la RTO con adaptación de modificadores
- Estudio e implementación de metodologías para la estimación de perturbaciones
- Implementación de sistemas de estimación de perturbaciones en la RTO con adaptación de modificadores
- Proponer un sistema experimental de los métodos estudiados a escala laboratorio.

2. Antecedentes generales

2.1 Problemas de optimización

La optimización de procesos se puede definir como la búsqueda de la mejor solución para un proceso y/o sistema dado, en conjunto con sus respectivas restricciones. Esta tarea requiere de tres elementos: primero, se debe contar con una función objetivo que cuantifique una medida del rendimiento que necesita ser minimizado o maximizado, como ejemplo se pueden mencionar los costos de proceso, rendimiento, beneficio obtenido, entre otros. Segundo, se requiere de un modelo predictivo que describa el comportamiento del sistema, lo cual se traduce en un conjunto de ecuaciones e inecuaciones que representen las restricciones que definen la región factible que delimita el rendimiento del sistema. Y tercero, es necesario contar con grados de libertad disponibles para satisfacer las restricciones y mejorar la función objetivo. La resolución de un problema de optimización se puede obtener valorando iterativamente dichas variables. En los problemas de ingeniería se puede caracterizar estas variables de decisión interpretándolas como los grados de libertad del proceso (Biegler, 2010).

La optimización es una de las tareas fundamentales en los procesos, por lo que es frecuentemente aplicada en las actividades de ingeniería. El problema es que en muchos casos esta tarea es realizada mediante prueba y error en el proceso, lo cual puede ocasionar problemas operacionales o un incumplimiento de las restricciones. Para evitar dichos problemas, se debe adoptar un enfoque sistemático que permita llegar a la mejor solución del problema de optimización, permitiendo un trabajo más eficiente y proporcionando cierta garantía de que la solución encontrada es la mejor de todas (Biegler, 2010).

2.2 Sistema de supervisión de procesos

Uno de los temas de importancia en la ingeniería de procesos, es el control de los procesos y/o sistemas operacionales. Aquí, lo que se busca es que el sistema trabaje bajo una condición establecida como normal, ajustando variables manipulables a ciertos valores denominados *set point*, garantizando así los resultados del sistema. Existen distintos tipos de control como, por ejemplo, los basados en algoritmos matemáticos, otros como las estrategias convencionales de PID o también los llamados modelos predictivos. Adicionalmente, existen otros tipos de estrategias como el control heurístico en base a sistemas expertos, redes neuronales, entre otros. Todo lo antes mencionado es lo que conforma a los sistemas encargados de la regulación en la supervisión de procesos.

Se entiende como supervisión de procesos al conjunto de acciones realizadas para asegurar el correcto funcionamiento del proceso incluso en situaciones anómalas. La supervisión está presente en todos los procesos productivos y se realiza a través de encargados y trabajadores especializados que detectan estos comportamientos anómalos y actúan ajustando variables o cambiando consignas para conservar la correcta operación del proceso y mejorar el rendimiento del mismo (Colomer, Meléndez, & Ayza, 2000). Estas mismas tareas pueden ser desarrolladas de manera sistemática por la optimización en tiempo real,

ya que su propósito es utilizar toda la información y conocimiento disponible de los procesos para la regulación de variables que permitan seguir las consignas impuestas y llegar al óptimo del proceso.

2.3 Optimización en tiempo Real (RTO)

En los procesos industriales, las plantas cuentan con una gran cantidad de unidades interconectadas, por lo que encontrar el punto de operación óptimo no es una tarea fácil. Utilizar la intuición o el cálculo fuera de línea (off-line) es insuficiente debido a las dificultades del proceso, su incertidumbre y las constantes perturbaciones que modifican las condiciones de operación. Por lo que es necesario un mecanismo sistemático para llegar al óptimo de operación. La optimización en tiempo real, RTO por sus siglas en inglés, es una herramienta que busca las condiciones óptimas del sistema a pesar de las incertidumbres (Cutler & Perry, 1983).

En las plantas que cuentan con un gran sistema de automatización, la supervisión de esta generalmente se aborda mediante un sistema jerárquico de toma de decisiones que involucra varios niveles que incluyen la programación, operación en tiempo real y control de procesos. La RTO se encuentra en un nivel que toma decisiones a mediano plazo, con una escala de tiempo de horas hasta pocos días, teniendo en cuenta los objetivos económicos. La estructura de la RTO se muestra en la Figura 2.1.

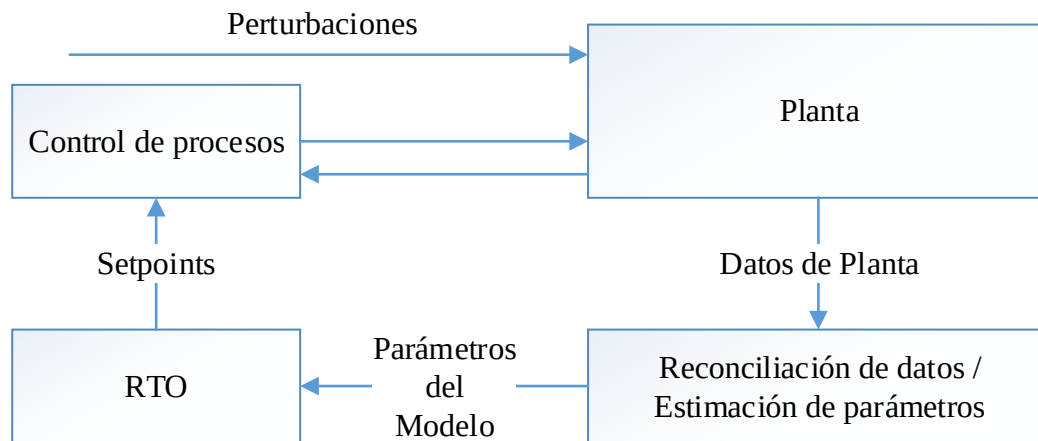


Figura 2.1. Componentes de la RTO.

Se combinan los datos de la planta en estado estacionario con un modelo de planta en un paso de reconciliación de datos y estimación de parámetros. Luego el modelo de estimación resultante se resuelve para actualizar las condiciones de funcionamiento en estado estacionario. Estas condiciones se entregan al sistema de control modificando las consignas que dirigen la planta, donde este ciclo es actualizado en un par de horas. Una suposición clave es que el modelo de estacionario es suficiente para describir la planta, y que el sistema de control puede manejar las dinámicas y perturbaciones rápidas. Existen una serie de desafíos en la implementación de la RTO, que incluyen la formulación de modelos consistentes para el manejo de plantas manteniendo la estabilidad de los ciclos, asegurando soluciones útiles frente a perturbaciones, resolviendo los problemas forma rápida y confiable (Biegler, 2010).

Matemáticamente, este problema de optimización se puede formular como la Ecuación 2.1.

$$\begin{aligned}
& \min_{\mathbf{u}} \Phi_p := \phi(\mathbf{u}, \mathbf{y}) \\
& \text{s. t.:} \\
& \mathbf{G}_p := \mathbf{g}_p(\mathbf{u}, \mathbf{y}) \leq 0 \\
& \mathbf{u}^L \leq \mathbf{u} \leq \mathbf{u}^U
\end{aligned} \tag{2.1}$$

Donde $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_u}$ son las variables de decisión, $\mathbf{u}^L$ y $\mathbf{u}^U$, sus límites inferior y superior, respectivamente, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n_y}$ corresponde a las mediciones de las variables de salida, $\mathbf{g}_p: \mathbb{R}^{n_u} \times \mathbb{R}^{n_y} \rightarrow \mathbb{R}$ corresponde a las restricciones, y $\Phi_p: \mathbb{R}^{n_u} \times \mathbb{R}^{n_y} \rightarrow \mathbb{R}$ la función de costo generalmente de carácter económico. El subíndice $(\cdot)_p$ denota variables asociadas al proceso. Al resolver la ecuación 2.1 se obtiene el punto de operación óptimo $\mathbf{u}_p^*$ que minimiza la función de costo y a su vez cumple con las restricciones del proceso. Debido a que no se conoce una representación exacta del sistema real o proceso, se utiliza un modelo que aproxima al sistema, como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned}
& \min_{\mathbf{u}} \Phi_m := \phi(\mathbf{u}, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{y}) \\
& \text{s. t.:} \\
& \mathbf{G}_m := \mathbf{g}_m(\mathbf{u}, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{y}) \leq 0 \\
& \mathbf{u}^L \leq \mathbf{u} \leq \mathbf{u}^U
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Donde $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_u}$ son las variables de decisión, $\mathbf{u}^L$ y $\mathbf{u}^U$, sus límites inferior y superior respectivamente, $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{n_\alpha}$ son los parámetros del modelo utilizado e $\mathbf{y}$ representa las mediciones obtenidas del modelo. El subíndice $(\cdot)_m$ denota variables asociadas al modelo. Al resolver esta ecuación se obtiene el punto de operación $\mathbf{u}_m^*$, el cual puede ser aplicado al proceso. Se debe tener en consideración que el modelo es una representación de la realidad basada en el conocimiento de la fenomenología del sistema. Producto de esto y debido a otras fuentes de incertidumbre, la solución $\mathbf{u}_m^*$, generalmente no coincide con el óptimo $\mathbf{u}_p^*$, lo que puede implicar sub-optimalidad y comportamientos infactibles si $\mathbf{u}_m^*$ se aplica al proceso directamente.

2.3.1 Condiciones necesarias de optimalidad

Un mínimo local de la Ecuación 2.2 puede ser caracterizada por las condiciones necesarias de optimalidad (o NCO, por sus siglas en inglés) (Bazaraa, Sherali, & Shetty, 1993). Para esto se requiere que los gradientes de las restricciones activas sean linealmente independientes. Siempre que las restricciones mantengan esta característica en el punto $\mathbf{u}_m^*$, y las funciones de costo y restricciones sean diferenciables en dicho punto, existirán unos únicos multiplicadores de Lagrange, de tal manera que se cumplan las condiciones de Karush-Khun-Tucker (KKT) en dicho punto, descritas por las Ecuaciones de balance de fuerza (2.3) y de factibilidad (11.2), las cuales se describen a continuación (Biegler, 2010):

Balance de fuerzas: Es conveniente definir la función Lagrangiana según 2.3, con μ y v como los multiplicadores de las restricciones de desigualdad (g) e igualdad (h), respectivamente. Las soluciones para la condición de estacionariedad se obtienen al igualar la Ecuación 2.3 a 0.

$$\nabla_x L(u^*, \mu^*, v^*) = \nabla f(u^*) + \nabla g(u^*)^T \mu^* + \nabla h(u^*)^T v^* \quad 2.3$$

Factibilidad: Las restricciones de desigualdad e igualdad deben ser satisfechas, como se muestra en la Ecuación 11.2:

$$g(u^*) \leq 0, h(u^*) = 0 \quad 2.4$$

También se debe tener en consideración el teorema de Holguras Complementarias que permite encontrar la solución óptima del problema dual cuando se conoce la solución óptima del problema primal, a través de la resolución de un sistema de ecuaciones conformado por las variables de decisión y las restricciones (del modelo primal y dual). Además, a esto, es necesario que el Hessiano del Lagrangiano sea definido positivo, lo cual es suficiente para asegurar que el punto u^* es un mínimo local.

2.3.2 RTO de dos etapas

La RTO emerge a comienzos de los años 1970 con un algoritmo de dos etapas: Estimación de parámetros y optimización económica. En el primer paso, las incertidumbres son consideradas mediante la actualización de los parámetros α de un modelo no lineal del proceso según la Ecuación 2.5, donde $\bar{y}$ corresponde a las medidas del proceso. Con los parámetros actualizados del modelo, se realiza una optimización económica obteniendo un nuevo punto de estado estacionario (Ecuación 2.2) (Bamberger & Isermann, 1978). El nuevo punto de operación es aplicado al proceso en un ciclo iterativo hasta que no se observen mejoras en la función de costos.

$$\begin{aligned} \min_{\alpha} \Phi_{id} &:= (y - \bar{y})^T R (y - \bar{y}) \\ s. t.: \\ g_m(u, \alpha, y) &\leq 0 \\ y &= h(u, \alpha) \end{aligned} \quad 2.5$$

Donde $\Phi_{id} : \mathbb{R}^{n_y} \rightarrow \mathbb{R}^+$ representa la función objetivo que corresponde a la sumatoria de las diferencias al cuadrado entre las mediciones del proceso y las obtenidas del modelo. Debido a que el modelo no es una representación fiel de la realidad, el problema de optimización dependerá de los parámetros del modelo y la estimación de dichos parámetros cambiará según los resultados de la estimación económica. A continuación, se muestra la Figura 2.2, que representa el algoritmo utilizado para la estimación de dos etapas.

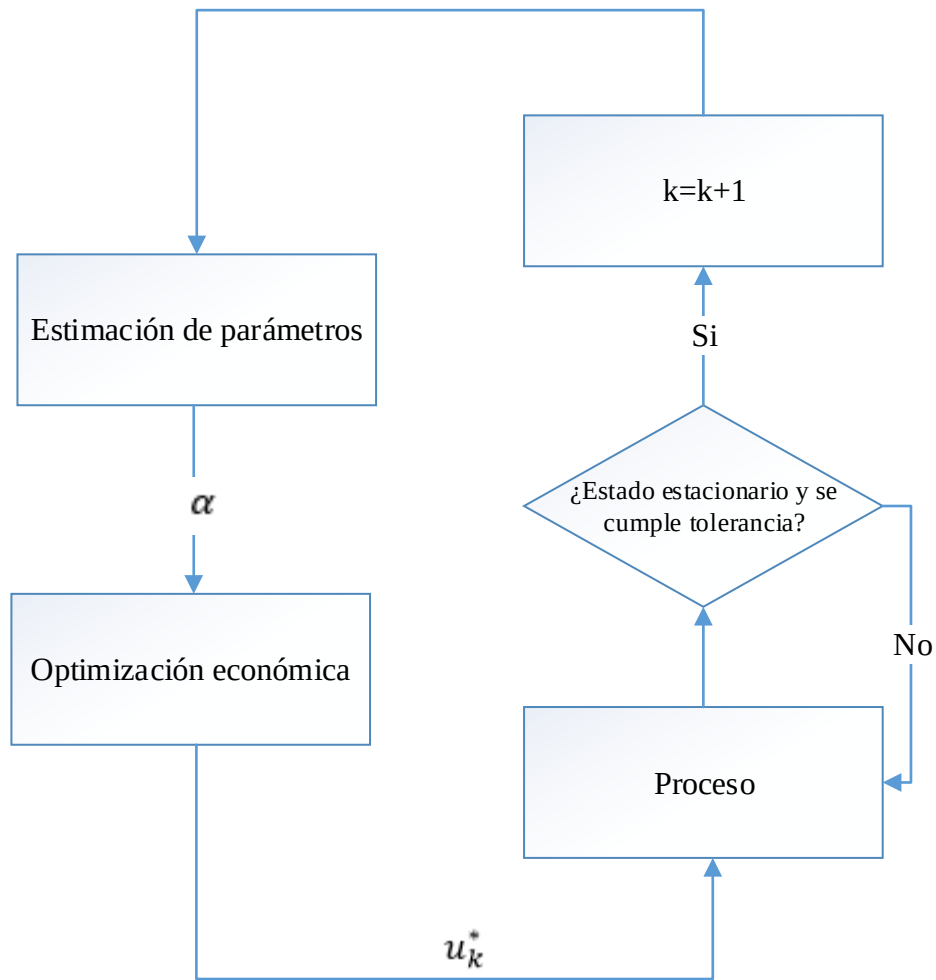


Figura 2.2. Algoritmo de la metodología de 2 etapas.

2.3.3 Integrated System Optimization Parameter Estimation (ISOPE)

La incertidumbre de modelado puede ser definida como paramétrica o estructural. En el caso de la incertidumbre estructural, no existe un conjunto de valores para los parámetros del modelo que, al ser aplicados en el problema de optimización económica, se obtenga como resultado $\mathbf{u}_p^*$. Esto también se puede entender como la incertidumbre que se produce al no considerar todas las interacciones que existen entre las variables de decisión y las variables de salida de un proceso. Para este tipo de incertidumbre, el algoritmo de dos pasos no necesariamente convergerá al óptimo del proceso. Es por esto que, a finales de los 70, Roberts senta las bases hacia la convergencia del óptimo de un proceso sin restricciones cuando existe incertidumbre estructural, desarrollando el método “Integrated System Optimization Parameter Estimation” (ISOPE), en donde se modifica la función objetivo del problema económico agregando un término adicional que considera la diferencia entre los gradientes de la función de costos en el proceso y del modelo (Roberts, 1979).

Este algoritmo combina el uso del problema de estimación de parámetros, como el de la Ecuación 2.3, y la definición de un problema de optimización modificado, de tal manera que, la convergencia las condiciones de KKT de la planta coincidan con las del modelo. La idea clave de este algoritmo es incorporar información del gradiente de la planta como un término de corrección de gradiente en la función de costos.

Primero se resuelve un problema de estimación de parámetros como el de la Ecuación 2.5. Este problema es resuelto buscando las variables de salida del modelo y el proceso coincidan:

$$\mathbf{y}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\alpha}) = \bar{\mathbf{y}}(\mathbf{u}) \quad 2.6$$

Luego, asumiendo que el gradiente de las variables de salida del proceso está disponible, se calcula el modificador ISOPE $\boldsymbol{\lambda}_k \in \mathbb{R}^{n_u}$, de acuerdo con la Ecuación 2.7.

$$\boldsymbol{\lambda}_k^T = \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{y}(\mathbf{u}_{k-1}, \boldsymbol{\alpha})) \left[\frac{\partial \bar{\mathbf{y}}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}_{k-1}) - \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}_{k-1}, \boldsymbol{\alpha}) \right] \quad 2.7$$

Utilizando los parámetros $\boldsymbol{\alpha}$ estimados y el modificador $\boldsymbol{\lambda}_k^T$, el nuevo punto óptimo de operación $\mathbf{u}_{k+1}^*$ se obtiene del problema de optimización presentado en la Ecuación 2.8.

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{u}} \Phi_m &:= \phi(\mathbf{u}, \mathbf{y}) + \boldsymbol{\lambda}_k^T \mathbf{u} \\ \text{s. t.:} \\ \mathbf{u}^L &\leq \mathbf{u} \leq \mathbf{u}^U \end{aligned} \quad 2.8$$

El nuevo punto de operación es determinado por un filtro de primer orden, como el presentado en la Ecuación 2.9

$$\mathbf{u}_k = K\mathbf{u}_k^* + (1 - K)\mathbf{u}_{k-1} \quad 2.9$$

2.3.4 Metodología de adaptación de modificadores

En un trabajo se demostró que el método ISOPE no depende de la estimación de parámetros inciertos, sino que de la igualdad entre las salidas del proceso y del modelo, por esta razón se añade al problema con restricciones de desigualdad un corrector $\boldsymbol{\varepsilon}_k$ que resulta de la diferencia entre las restricciones del proceso y el modelo para obtener los mismos resultados (Tatjewski, 2002). Posteriormente, Gao y Engell definieron nuevos modificadores para las restricciones (Gao & Engell, 2005), siendo su principal contribución el modo en el que se corrigen las restricciones del proceso. Estos correctores se calculan como la diferencia entre los gradientes de las restricciones del proceso y del modelo, asegurando que el punto de operación obtenido bajo el supuesto de convergencia cumple con las NCO del proceso real. Más tarde, en el año 2009, surge la metodología de adaptación de modificadores (o MA, por sus siglas en inglés) presentada por Chachuat (Chachuat, Srinivasan, & Bonvin, 2009) y formalizada por Marchetti

(Marchetti, Chachuat, & Bonvin, 2009). La metodología de MA propone la incorporación de parámetros de corrección de orden uno y orden cero a la función objetivo y restricciones de desigualdad del problema de optimización basado en modelo, tal como lo muestra la Ecuación 2.10:

$$\begin{aligned}
\min_{\mathbf{u}} \Phi_m &:= \phi(\mathbf{u}, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{y}) + \boldsymbol{\lambda}_k^T (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{k-1}^*) \\
s. t.: & \\
\mathbf{G}_m &:= \mathbf{g}_m(\mathbf{u}, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{y}) + \boldsymbol{\gamma}_k^T (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{k-1}^*) + \boldsymbol{\varepsilon}_k \leq 0 \\
\mathbf{u}^L &\leq \mathbf{u} \leq \mathbf{u}^U
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Donde los modificadores se calculan como en la Ecuación 2.11:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\lambda}_k &= \nabla_{\mathbf{u}} \phi_{p,k-1} - \nabla_{\mathbf{u}} \phi_{m,k-1} \\
\boldsymbol{\gamma}_k &= \nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{G}_{p,k-1} - \nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{G}_{m,k-1} \\
\boldsymbol{\varepsilon}_k &= \mathbf{G}_{p,k-1} - \mathbf{G}_{m,k-1}
\end{aligned} \tag{2.11}$$

En esta formulación, el número de modificadores necesarios está dado por la Ecuación 2.12.

$$n_{\text{modificadores}} = n_{\text{restricciones}} + n_{\text{variables de decisión}}(n_{\text{restricciones}} + 1) \tag{2.12}$$

Como ventaja, esta metodología no necesita conocer a priori las restricciones activas, además de satisfacer las NCO incluso en presencia de incertidumbre estructural. Pero su principal inconveniente es que, aunque converja al óptimo del proceso, se puede seguir un camino no factible violando las restricciones. Para lo anterior se propone suavizar el cambio de los modificadores utilizado un filtro y así poder seguir un camino factible, como el presentado en la Ecuación 2.13.

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\lambda}_k &= (\mathbf{I} - \mathbf{K}_{\lambda})\boldsymbol{\lambda}_{k-1} + \mathbf{K}_{\lambda}(\nabla_{\mathbf{u}} \phi_{p,k-1} - \nabla_{\mathbf{u}} \phi_{m,k-1}) \\
\boldsymbol{\gamma}_k &= (\mathbf{I} - \mathbf{K}_{\gamma})\boldsymbol{\gamma}_{k-1} + \mathbf{K}_{\gamma}(\nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{G}_{p,k-1} - \nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{G}_{m,k-1}) \\
\boldsymbol{\varepsilon}_k &= (\mathbf{I} - \mathbf{K}_{\varepsilon})\boldsymbol{\varepsilon}_{k-1} + \mathbf{K}_{\varepsilon}(\mathbf{G}_{p,k-1} - \mathbf{G}_{m,k-1})
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Siendo $\mathbf{K}_{\lambda}$, $\mathbf{K}_{\gamma}$ y $\mathbf{K}_{\varepsilon}$ son matrices diagonales con valores entre 0 y 1 incluido.

A continuación, se presenta la Figura 2.3 donde se representa el esquema de implementación de esta metodología:

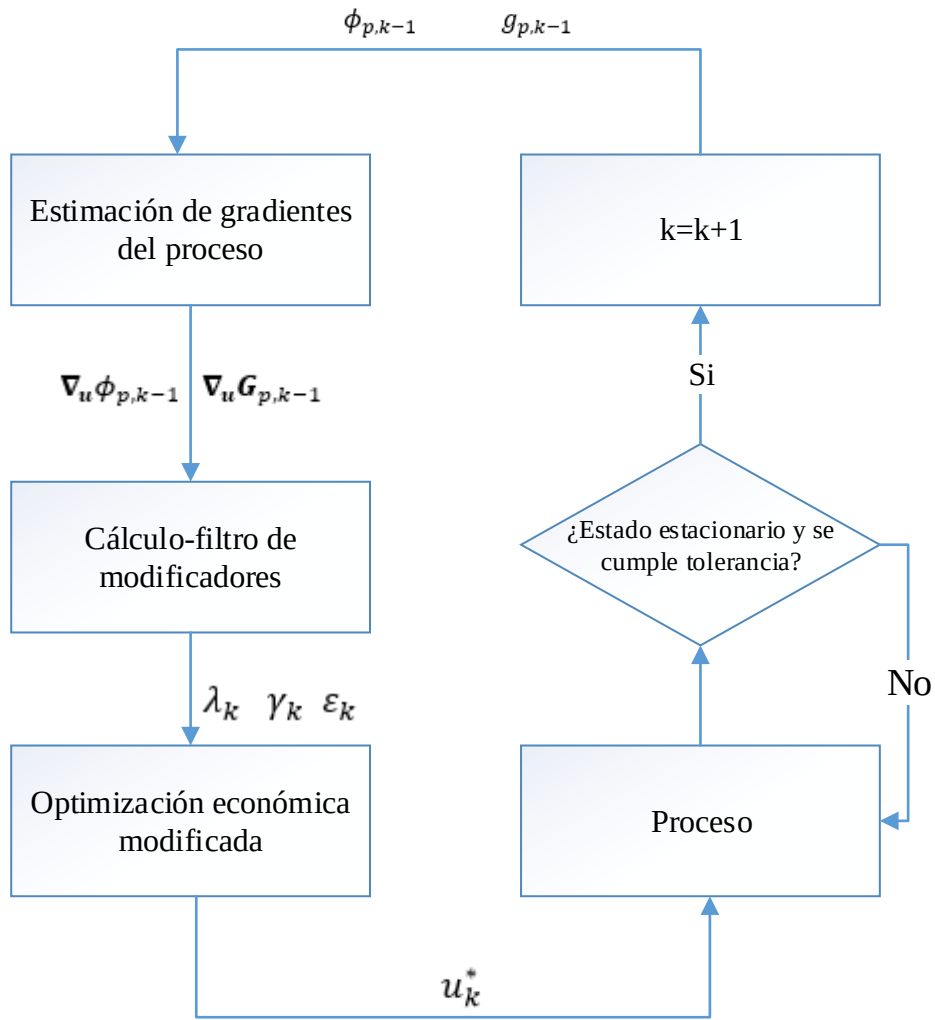


Figura 2.3. Algoritmo de implementación para metodología de adaptación de modificadores.

Como se puede notar, para esta metodología es necesario contar con el gradiente del proceso real. Para esto existen diferentes formas de obtener un valor aproximado. Uno de los más simples corresponde a las diferencias finitas (Roberts, 1979). Este consiste en aplicar muchos cambios alrededor del actual punto de operación con el fin de evaluar el cambio en las variables de salida. Este método permite tener suficiente exactitud en los procesos derivativos en un tiempo razonable en procesos pequeños, libres de ruido y con una dinámica rápida. Pero, se ha demostrado su ineficiencia para procesos grandes y lentos debido al tiempo necesario de estimación. Además, el ruido de las señales también reducen el rendimiento de este método (Mansour & Ellis, 2003), debido a la propiedad aditiva del error en la estimación de los gradientes. Esto afectaría a todos las metodologías que utilicen gradientes para la estimación de los modificadores.

Otra técnica utilizada para la estimación de gradientes es la *Dual Control Optimización* (Brdys & Tatjewski, 1994). En esta metodología, se utilizan los valores de las variables de decisión y medidas para

estimar los gradientes del proceso. Para esto, es necesario definir una restricción extra al problema de optimización (restricción dual), que asegure la suficiente excitabilidad en el cálculo de los gradientes.

2.3.5 Adaptación de Modificadores Dual

Corresponde a una versión del MA en la que, a través de añadir una restricción extra (restricción dual), se garantiza que las acciones de control aplicadas al proceso han generado una excitación suficiente en el proceso para estimar los gradientes experimentales adecuadamente. Para esto Brdýs y Tatjewski (1994) utilizaron los valores pasados de las variables de decisión y medidas disponibles, estimado las derivadas basada en el cálculo de las derivadas direccionales. Suponiendo que se cuenta con información de $n_u + 1$ soluciones de $\mathbf{u}^*$ de iteraciones previas de la RTO, se construye el vector de diferencias $\mathbf{s}_{ki}$ con respecto a iteraciones previas, definido en la Ecuación 2.14.

$$\mathbf{s}_{ki} = \mathbf{u}_{k-i} - \mathbf{u}_k \quad \forall i = 1 \dots n_u \quad 2.14$$

Siendo los vectores $\mathbf{s}_{ki}$ linealmente independientes, se puede construir una matriz cuadrada no singular $\mathbf{S}_k \in \mathbb{R}^{n_u \times n_u}$ formada por los vectores de diferencias de las variables de decisión con respecto a n_u periodos anteriores, tal como se muestra en la Ecuación 2.15.

$$\mathbf{S}_k = [\mathbf{s}_{k1} \dots \mathbf{s}_{kn_u}]^T \quad 2.15$$

Luego se obtienen los gradientes del proceso a partir de la definición de derivada como se muestra en la Ecuación 2.16.

$$\frac{\partial z}{\partial \mathbf{u}} \approx \frac{dz}{d\mathbf{u}} = (\mathbf{S}_k)^{-1} \begin{bmatrix} z(\mathbf{u}_{k-1}) & - & z(\mathbf{u}_k) \\ & \vdots & \\ z(\mathbf{u}_{k-n_u}) & & z(\mathbf{u}_k) \end{bmatrix} \quad 2.16$$

Para asegurar que los gradientes son obtenidos con exactitud, se añade la restricción dual antes mencionada como $(\delta^{-1}(\mathbf{S}_k) \geq \delta_L)$, donde el δ representa el número de condicion de la matriz $\mathbf{S}_k$, y δ_L representa el valor mínimo de excitación del proceso (Gao, Wenzel, & Engell, 2016). Sin embargo, la evolución de la RTO con esta metodología es muy sensible al valor que se le asigne a esta restricción, por lo que su valor debe ser sintonizado cuidadosamente; un valor alto significa una mayor excitación en el proceso pero que puede conducir a soluciones no factibles, por otro lado, un valor pequeño puede provocar que los gradientes no sean calculados correctamente. Así, es como esta restricción le entrega la característica dual al método: como objetivo primal que la optimización intenta converger al óptimo del modelo, y la restricción dual garantiza que la siguiente iteración de la RTO tendrá un nivel de energía suficiente para estimar el gradiente del proceso (objetivo dual). La formulación matemática de esta metodología se puede describir como de acuerdo con la Ecuación 2.17.

$$\begin{aligned}
& \min_{\mathbf{u}} \Phi_m := \phi(\mathbf{u}, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{y}) + \boldsymbol{\lambda}_k^T (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{k-1}^*) \\
& \text{s. t.:} \\
& \mathbf{G}_m := \mathbf{g}_m(\mathbf{u}, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{y}) + \boldsymbol{\gamma}_k^T (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{k-1}^*) + \boldsymbol{\varepsilon}_k \leq 0 \\
& \delta^{-1}(\mathcal{S}_k) \geq \delta_L \\
& \mathbf{u}^L \leq \mathbf{u} \leq \mathbf{u}^U
\end{aligned} \tag{2.17}$$

2.3.6 Adaptación de modificadores anidados

Si bien las técnicas basadas en el cálculo de gradientes garantizan que los puntos de operación obtenidos satisfacen las NCO del proceso, en aplicaciones reales la estimación de los gradientes puede ser un problema, ya que las perturbaciones necesarias para su obtención pueden ser difíciles de implantar, o los gradientes mal estimados debido a la falta de exactitud en los datos producto de los ruidos de medición. Para evitar esto, Navia (2013) propone un enfoque totalmente distinto, en el cual no se necesita estimar los gradientes de la planta. El problema de RTO se reformula como dos problemas de optimización anidados: en el primero (capa superior) se minimiza la función Lagrangiana medida directamente de la planta con lo que se obtienen los modificadores; y en la segunda se realiza la optimización económica para obtener los puntos de operación óptimos. La Ecuación 2.18 presenta el primer problema de optimización:

$$\min_{\boldsymbol{\Lambda}} L_p(\mathbf{u}_{\infty}(\boldsymbol{\Lambda}), \boldsymbol{\mu}_{\infty}(\boldsymbol{\Lambda})) \tag{2.18}$$

Donde $\boldsymbol{\Lambda} := (\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\gamma})$ representa el conjunto de modificadores de primer orden, L_p es la función lagrangiana dada por la Ecuación 2.19 y $\boldsymbol{\mu}$ los multiplicadores de Lagrange.

$$L_p(\mathbf{u}_{\infty}(\boldsymbol{\Lambda}), \boldsymbol{\mu}_{\infty}(\boldsymbol{\Lambda})) = \Phi_p(\mathbf{u}_{\infty}(\boldsymbol{\Lambda})) + \boldsymbol{\mu}_{\infty}(\boldsymbol{\Lambda})^T \mathbf{G}_p(\mathbf{u}_{\infty}(\boldsymbol{\Lambda})) \tag{2.19}$$

Notar que en esta etapa de optimización los modificadores son considerados como parámetros constantes que son actualizados en cada etapa de RTO. A continuación, en la Figura 2.4 se representa el esquema de implementación de esta metodología.

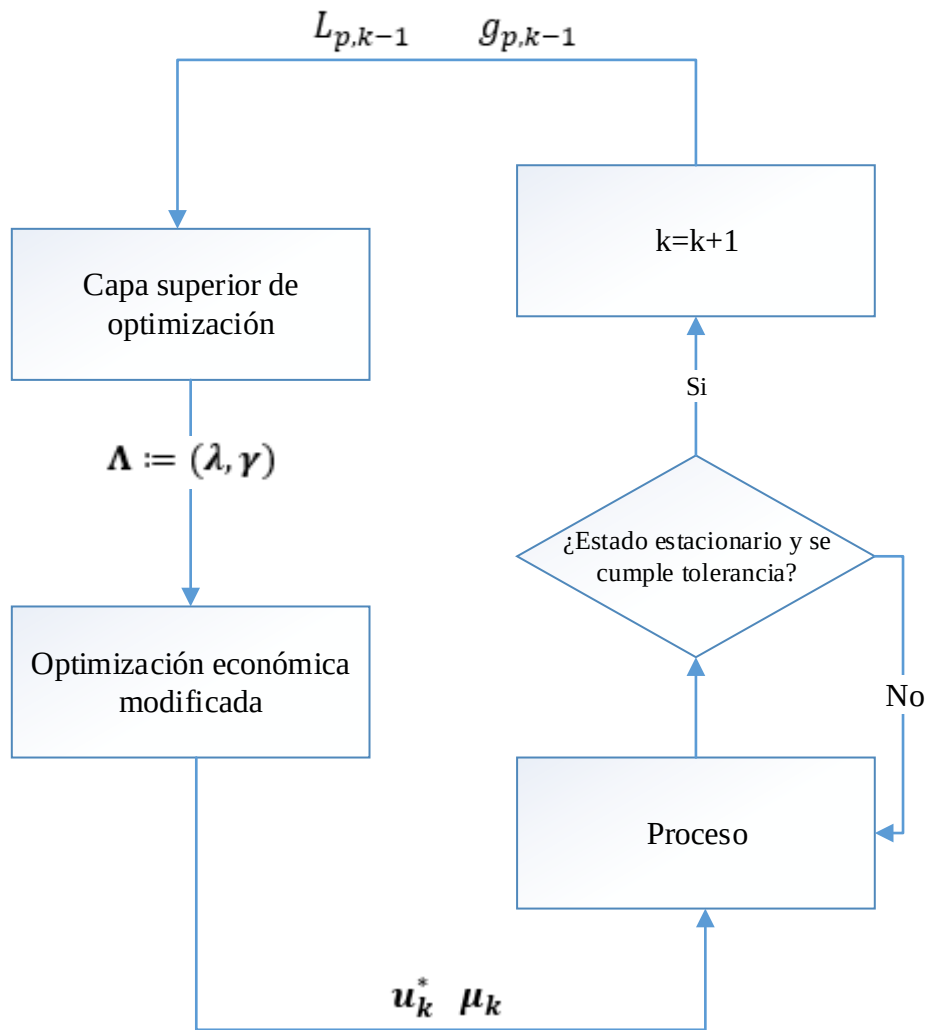


Figura 2.4. Algoritmo de implementación para metodología de adaptación de modificadores anidada.

3. Perturbaciones

Bajo las condiciones establecidas como normales o *set point* para el proceso, se obtiene una superficie de respuesta definida por las variables de decisión y la función de costos, delimitada por las restricciones del proceso. El problema surge cuando las perturbaciones modifican esta superficie de respuesta, esto pues los cambios observados en las variables de salida pueden ser tanto producto de modificaciones en las variables de decisión, como consecuencia de cambios en variables no controladas. Las perturbaciones en las operaciones de proceso pueden originarse debido a muchos aspectos, como cambios en la demanda o en pedidos de producto, fallas de lotes o equipos, variabilidad del tiempo de procesamiento, cambios de recursos, entre otros.

En los sistemas de supervisión es necesario disponer de la mayor cantidad de información disponible para así poder optimizar el proceso. Además, es necesario tratar esta información de manera tal que sea útil para el correcto funcionamiento de los sistemas de control. Por lo que si la RTO no cuenta con la información de las perturbaciones puede no converger al óptimo del proceso y/o no cumplir con las NCO, debido a los constantes cambios provocados por las perturbaciones.

3.1 Clasificación de perturbaciones

Para poder incluir esta información es necesario en primera instancia clasificar las perturbaciones o fuentes de incertidumbre. En base a la naturaleza de la fuente de incertidumbre o perturbaciones en un proceso, Pistikopoulos (Pistikopoulos, 1995) propuso la siguiente clasificación:

- A. Incertidumbre inherente al modelo, como constantes cinéticas, propiedades físicas, coeficientes de masa / transferencia de calor
- B. Incertidumbres internas al proceso, como por ejemplo la velocidad de flujo y las variaciones de temperatura, las fluctuaciones de la calidad de la corriente de alimentación y el tiempo de procesamiento de un producto.
- C. Incertidumbres externas como la disponibilidad de la corriente de alimentación, las demandas de los productos y los cambios en sus precios
- D. Incertidumbre discreta como disponibilidad de equipos y otros eventos discretos aleatorios, como la ausencia del personal operativo.

La RTO y sus distintas metodologías explicadas en la Sección 2.3 pueden mitigar las perturbaciones mencionadas en la clasificación A, que corresponden a la incertidumbre paramétrica y estructural. Además, se puede considerar que las perturbaciones descritas en C afectan al problema de optimización, principalmente cambiando las condiciones en las fronteras del problema. Pero son las descritas en B las que cambiarían en forma directa la superficie de respuesta, afectando el desempeño de la RTO.

Dentro de las perturbaciones descritas en B, será necesario realizar una subclasificación según la frecuencia de cambio de las perturbaciones. Aquellas perturbaciones donde la frecuencia de cambio sea

menor que la ejecución de la capa de RTO, podrían afectar la solución del problema, pero no así la estimación de los gradientes del proceso en cada iteración de la RTO. Por otro lado, aquellas perturbaciones que tengan una tasa de cambio igual o mayor a la capa de RTO, podrían afectar la estimación de los gradientes, y a su vez, la estimación de los modificadores, afectando directamente la solución del problema de optimización.

Finalmente, es necesario clasificar las perturbaciones según su grado de conocimiento: medibles y no medibles. Una perturbación podría ser no medible debido a factores operacionales como una temperatura o pH tal que estropearían los equipos de medición. Por lo tanto, es necesario identificar el tipo de perturbación a la cual está sometido el proceso y así saber cómo incluir información de ellas en el problema de optimización. En Navia (2018) se presentó una propuesta para la inclusión de las perturbaciones en la RTO y se trabajó con perturbaciones medibles. En este trabajo se presentará una propuesta para las perturbaciones que no pueden ser medidas.

3.2 Propuesta para el manejo de perturbaciones no medibles

Las perturbaciones que tiene una frecuencia de cambio similar (o menor) a la ejecución de la RTO, afectarían al proceso de toma de decisiones basado en RTO con adaptación de modificadores tanto en la ubicación del óptimo, como también en la estimación de los modificadores basados en gradientes del proceso. Con base en lo anterior, es necesario incluir información de las perturbaciones de este tipo tanto en el problema de optimización basado en el modelo del sistema, como también en el cálculo de los gradientes experimentales (Navia et al., 2018).

Para esto se considera que se dispone de un sistema con n_u variables de decisión y n_d perturbaciones, con una frecuencia de cambio igual o menor que la ejecución de la capa de RTO, respecto a las cuales es necesario estimar el gradiente del proceso. Si el total de variables de entrada que afectan a los estados del proceso es $n = n_u + n_d$, entonces para estimar un gradiente de una variable de proceso mediante una aproximación de Taylor de primer orden, es necesario al menos $n + 1$ medidas $\{\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_{k-1}, \dots, \mathbf{y}_{k-n}\}$, $\{\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_{k-1}, \dots, \mathbf{u}_{k-n}\}$ y $\{\mathbf{d}_k^I, \mathbf{d}_{k-1}^I, \dots, \mathbf{d}_{k-n}^I\}$, siendo $\mathbf{d}^I$ las perturbaciones, según como se muestra en la Ecuación 3.1.

$$\nabla_{\bar{\mathbf{u}}} \mathbf{y}_k^T \approx \mathbf{y}_k (\bar{\mathbf{u}}_k)^{-1} \quad 3.1$$

Donde:

$$\nabla_{\bar{\mathbf{u}}} \mathbf{y}_k := [\nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{y}_k, \nabla_{\mathbf{d}_I} \mathbf{y}_k]^T \quad 3.2$$

$$\mathbf{y}_k := [\Delta \mathbf{y}_{k-1}, \dots, \Delta \mathbf{y}_{k-n}] \quad 3.3$$

$$\bar{\mathbf{u}}_k := \begin{bmatrix} \mathbf{u}_k \\ \mathcal{D}_k \end{bmatrix} \quad 3.4$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_k &:= [\Delta \mathbf{u}_{k-1}, \dots, \Delta \mathbf{u}_{k-n}] \\ \mathcal{D}_k &:= [\Delta \mathbf{d}_{k-1}^I, \dots, \Delta \mathbf{d}_{k-n}^I] \end{aligned} \quad 3.5$$

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{y}_{k-i} &:= \mathbf{y}_k - \mathbf{y}_{k-i}, & i = 1 \dots n \\ \Delta \mathbf{u}_{k-i} &:= \mathbf{u}_k - \mathbf{u}_{k-i}, & i = 1 \dots n \\ \Delta \mathbf{d}_{k-i}^I &:= \mathbf{d}_k^I - \mathbf{d}_{k-i}^I, & i = 1 \dots n \end{aligned} \quad 3.6$$

Por lo que partir de las ecuaciones que se muestran, es necesario conocer las medidas de $\mathbf{u}$ e $\mathbf{y}$, además de ser necesario estimar el valor de $\mathbf{d}^I$ en cada iteración de la RTO.

Esta metodología será implementa junto con la RTO con Adaptación de Modificadores Dual.

En el siguiente capítulo se hablará de dos metodologías que permiten la estimación de perturbaciones, para luego ser incluidas en la RTO.

4. Estimación de perturbaciones

En este trabajo se propone implementar dos metodologías para la estimación de las perturbaciones: mínimos cuadrados y filtro de Kalman. A continuación, se detalla cada una de ellas.

4.1 Mínimos cuadrados

En 1795 Karl Friedrich Gauss formuló el concepto básico de mínimos cuadrados, bajo la idea de que los valores más apropiados para parámetros desconocidos pero deseados, son los valores más probables. Él definió que el valor más probable de una cantidad desconocida es aquella para la cual la suma de los cuadrados de las diferencias entre los valores reales observados y calculados, multiplicados por un número que mide el grado de precisión es un mínimo. Desde entonces este método se ha aplicado para la solución de muchos problemas técnicos (Strejc, 1980).

Para su formulación matemática, suponer que se tiene un vector de constantes desconocidas $\mathbf{x}$ de n elementos, y que se cuenta con un vector $\mathbf{y}$ con k elementos de mediciones ruidosas. Para buscar la “mejor” estimación del vector $\mathbf{x}$, definido como $\bar{\mathbf{x}}$, se asume que cada elemento del vector de mediciones $\mathbf{y}$, es una combinación lineal de los elementos de $\mathbf{x}$, con la adición de ruido de medición $\mathbf{v}$:

$$\mathbf{y}_k = \mathbf{H}_{k1}\mathbf{x}_1 + \cdots + \mathbf{H}_{kn}\mathbf{x}_n + \mathbf{v}_k \quad 4.1$$

Donde $\mathbf{H}_{kn}$ corresponde a un coeficiente. Expresado de forma matricial la Ecuación 4.1:

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{v} \quad 4.2$$

Ahora, se define $\boldsymbol{\varepsilon}_y$ como la diferencia entre el vector de mediciones ruidosas y el vector $\mathbf{H}\bar{\mathbf{x}}$:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_y = \mathbf{y} - \mathbf{H}\bar{\mathbf{x}} \quad 4.3$$

La Ecuación 4.3 se define como medición residual. Como se mencionó anteriormente, Gauss definió que el valor más probable del vector $\mathbf{x}$, es el vector $\bar{\mathbf{x}}$ que minimiza la suma de los valores al cuadrado del vector $\boldsymbol{\varepsilon}_y$:

$$\mathbf{j} = \boldsymbol{\varepsilon}_{y1}^2 + \boldsymbol{\varepsilon}_{y2}^2 + \cdots \boldsymbol{\varepsilon}_{yn}^2 \quad 4.4$$

Escribiendo la Ecuación 4.4 en forma matricial. Se tiene:

$$\mathbf{j} = \boldsymbol{\varepsilon}_y \boldsymbol{\varepsilon}_y^T \quad 4.5$$

Lo anterior se puede escribir como un problema de optimización:

$$\min_{\bar{x}} \sum_{i=0}^n \boldsymbol{\varepsilon}_y \boldsymbol{\varepsilon}_y^T \quad 4.6$$

Este problema también puede estar sujeto a distintas restricciones de igualdad o desigualdad.

Propuesta 1

Para la estimación de perturbaciones, considerar $\mathbf{d}^I = [\xi_{d^I}]^T$, con $\xi_{d^I} \in \mathbb{R}^{n_\xi}$ como las perturbaciones que no pueden ser medidas. Para resolver la Ecuación 3.1 es necesario estimar $\xi_{d^I k}, \xi_{d^I k-1}, \dots, \xi_{d^I k-n}$. Para esto se propone resolver un problema de identificación con la ecuación 4.7 en cada iteración de la RTO.

$$\begin{aligned} \min_{\xi_k, \dots, \xi_{k-n}} \sum_{i=0}^n (\mathbf{m}_{M_{k-i}} - \mathbf{m}_{P_{k-i}})^T \mathbf{P}_k (\mathbf{m}_{M_{k-i}} - \mathbf{m}_{P_{k-i}}) \\ \text{s. t. :} \\ \mathbf{f}_M(\mathbf{x}_{k-i}, \mathbf{u}_{k-i}, \boldsymbol{\delta}_{k-i}, \xi_{k-i}, \boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{0}, \quad i = 0, \dots, n \\ \mathbf{m}_{M_{k-i}} = \mathbf{h}_M(\mathbf{x}_{k-i}, \mathbf{u}_{k-i}, \boldsymbol{\delta}_{k-i}, \xi_{k-i}, \boldsymbol{\alpha}), \quad i = 0, \dots, n \\ \xi_{k-i} \in \Xi, \quad i = 0, \dots, n \end{aligned} \quad 4.7$$

donde $\mathbf{m}_{M_k} \in \mathbb{R}^{n_M}$ y $\mathbf{m}_{P_k} \in \mathbb{R}^{n_M}$ corresponden a los vectores de medidas calculados con el modelo y obtenidos desde el proceso respectivamente, mientras que $\mathbf{h}_M: \mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_u} \times \mathbb{R}^{n_\alpha} \rightarrow \mathbb{R}^{n_m}$ es una función de medida obtenida con el modelo disponible. En la función objetivo $\mathbf{P}_k \in \mathbb{R}^{n_m \times n_m}$, $\mathbf{P}_k > \mathbf{0}$ corresponde a una matriz diagonal. De esta manera en cada iteración de la RTO se obtienen las $\xi_{d^I k}, \xi_{d^I k-1}, \dots, \xi_{d^I k-n}$ perturbaciones. Para su implementación será necesario definir cuántos estados pasados serán estimados, ya que afectará en forma directa el desempeño del estimador.

Propuesta 2

Alternativamente, el problema de estimación podría actualizar el valor de los parámetros del modelo. Para efectos de reducir la dimensionalidad del problema y, considerando que es de esperar que los parámetros tengan una frecuencia de cambio más baja que las perturbaciones, se puede asumir que estos se mantendrán constantes para los $n + 1$ estados estacionarios más recientes, tal como se muestra a continuación:

$$\min_{\xi_k, \dots, \xi_{k-n}, \alpha_k} \omega_k \sum_{i=0}^n (\mathbf{m}_{M_{k-i}} - \mathbf{m}_{P_{k-i}})^T \mathbf{P}_k (\mathbf{m}_{M_{k-i}} - \mathbf{m}_{P_{k-i}}) + (1 - \omega_k) \text{Var}(\alpha_k)$$

s. t. :

$$\mathbf{f}_M(\mathbf{x}_{k-i}, \mathbf{u}_{k-i}, \delta_{k-i}, \xi_{k-i}, \alpha_k) = \mathbf{0}, \quad i = 0, \dots, n$$

$$\mathbf{m}_{M_{k-i}} = \mathbf{h}_M(\mathbf{x}_{k-i}, \mathbf{u}_{k-i}, \delta_{k-i}, \xi_{k-i}, \alpha_k), \quad i = 0, \dots, n$$

$$\xi_{k-i} \in \Xi, \quad i = 0, \dots, n$$

$$\alpha_k \in \mathbf{A}$$

4.8

Propuesta 3

Las ecuaciones 4.7 y 4.8 representan la suma de las diferencias al cuadrado como función objetivo. Otras funciones pueden ser probadas para obtener una mayor robustez. Para este caso se propone utilizar la función *Fair* (Huber, 1981) como función objetivo del problema de optimización, la cual se presenta en la Ecuación 4.9.

$$\rho_j(\varepsilon_j) = C^2 \left[\frac{|\varepsilon_j|}{C} - \log \left(1 + \frac{|\varepsilon_j|}{C} \right) \right]$$

4.9

Donde ρ es el estimador asociado con la medición j , C es un parámetro de sintonización y ε el error estándar de predicción de la medida j . Esta función es convexa con primera y segunda derivada suave, por lo que para residuos pequeños es una buena aproximación del estimador de mínimos cuadrados. A medidas que los residuos se hacen más grandes, esta función pasa de un aumento cuadrático al aumento lineal. Por lo que a medida que los residuos se acercan al infinito, la función *Fair* no aumenta tan rápido como la de mínimos cuadrados. Para su uso es necesario realizar un ajuste de la constante C . Valores pequeños harán que función se vuelva lineal con residuos pequeños, lo que hace que se desvíe más de la función de mínimos cuadrados (Nicholson, López-Negrete, & Biegler, 2014).

4.2 Filtro de Kalman Extendido

El Filtro de Kalman (Kalman, 1960) es un procedimiento predictivo y recursivo basado en el uso de técnicas de estado estacionario y algoritmos recursivos, utilizado para la estimación de estados de un sistema dinámico perturbado con ruido blanco. Para mejorar la estimación de los estados el Filtro de Kalman, se utilizan mediciones del sistema que están relacionados con los estados. Este filtro consta de dos pasos: el primero es la predicción de estados mediante el modelo dinámico, y el segundo corresponde a una etapa de corrección utilizando las mediciones del sistema, buscando minimizar la covarianza del estimador.

A pesar de que originalmente este filtro fue desarrollado para problemas lineales, es habitualmente utilizado en muchos problemas no lineales, para lo cual se utilizan las derivadas parciales como una aproximación lineal de las relaciones no lineales. Schmit (1985) introduce la idea de evaluar las derivadas parciales en la estimación de valores de las variables de estado. Este enfoque es conocido como Filtro de

Kalman Extendido (EKF, por sus siglas en inglés provenientes de *Extended Kalman Filter*) el cual es utilizado para sistemas continuos con mediciones continuas.

Ya que existen muchos sistemas ingenieriles que son gobernados por dinámicas continuas donde las mediciones son obtenidas en instantes de tiempos discretos, es necesario modificar el EKF para que sea aplicado en este tipo de sistemas. Es de aquí que se deriva el *Hybrid EKF* (Simon, 2006) que considera sistemas continuos con mediciones discretas.

Suponer que se tiene un sistema continuo en el tiempo con mediciones discretas como se presenta a continuación:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{w}, t) \\ \mathbf{y}_k &= \mathbf{h}_k(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) \\ \mathbf{w}(t) &\sim (0, \mathbf{Q}) \\ \mathbf{v}_k &\sim (0, \mathbf{R}_k)\end{aligned}\tag{4.10}$$

Donde $\mathbf{f}$ corresponde al modelo dinámico del sistema, $\mathbf{x}$ los estados del sistema, $\mathbf{u}$ las variables de decisión, $\mathbf{w}$ el ruido del modelado, t al instante de tiempo, $\mathbf{y}_k$ las mediciones discretas del sistema, $\mathbf{h}_k$ función de medición y $\mathbf{v}_k$ el ruido de medición. Además, se asume que el ruido de modelo es ruido blanco con media 0 y covarianza $\mathbf{Q}$, y que el ruido de medición también es ruido blanco con media 0 y covarianza $\mathbf{R}_k$.

Como primera etapa se obtiene una estimación del estado, resolviendo:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{w}, t)\tag{4.11}$$

$$\dot{\mathbf{P}} = \mathbf{A}\mathbf{P} + \mathbf{P}\mathbf{A}^T + \mathbf{L}\mathbf{Q}\mathbf{L}^T\tag{4.12}$$

Donde:

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &= \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}(\bar{\mathbf{x}}_k^-) \\ \mathbf{L} &= \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{w}}(\bar{\mathbf{x}}_k^-)\end{aligned}\tag{4.13}$$

Primero se resuelve la Ecuación 4.11 entre los instantes de tiempo $k - 1$ y k . Este último corresponde al instante de tiempo donde se obtienen las mediciones discretas. De esta resolución se obtiene $\bar{\mathbf{x}}_k^-$, que corresponde a la estimación de las variables de estado. Este resultado es utilizado para obtener el valor de las derivadas parciales según la ecuación 4.13 y luego utilizarlas para resolver la Ecuación 4.14 entre los mismos instantes de tiempo obteniendo $\mathbf{P}_k^-$. Esta última corresponde a la matriz de propagación. El superíndice (-) denota que es una estimación a priori.

Luego viene la etapa de corrección donde se obtienen la estimación a posteriori, donde se incluyen las mediciones discretas obtenidas en el instante de tiempo k . Primero se calcula la ganancia de Kalman según:

$$\mathbf{K}_k = \mathbf{P}_k^- \mathbf{H}_k^T (\mathbf{H}_k \mathbf{P}_k^- \mathbf{H}_k^T + \mathbf{M}_k \mathbf{R}_k \mathbf{M}_k^T)^{-1} \quad 4.14$$

Donde:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}}(\bar{\mathbf{x}}_k^-) \\ \mathbf{M} &= \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{v}}(\bar{\mathbf{x}}_k^-) \end{aligned} \quad 4.15$$

Luego, se utiliza la ganancia de Kalman para actualizar el valor de las estimaciones, según la Ecuación 4.16, obteniendo los valores a posteriori.

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{x}}_k^+ &= \bar{\mathbf{x}}_k^- + \mathbf{K}_k (\bar{\mathbf{x}}_k^- - \mathbf{h}_k(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k)) \\ \mathbf{P}_k^+ &= (\mathbf{I} - \mathbf{K}_k \mathbf{H}_k) \mathbf{P}_k^- (\mathbf{I} - \mathbf{K}_k \mathbf{H}_k)^T + \mathbf{K}_k \mathbf{M}_k \mathbf{R}_k \mathbf{M}_k^T \mathbf{K}_k^T \end{aligned} \quad 4.16$$

Es importante destacar que $\mathbf{P}_k$ y $\mathbf{K}_k$ no pueden ser calculados de manera *off-line* ya que dependen de la variable $\mathbf{H}_k$ y $\mathbf{M}_k$, que a su vez depende de $\bar{\mathbf{x}}_k^-$. Una explicación más detallada de este algoritmo puede ser vista en Simón (2016), página 405.

Para poder estimar el valor de las perturbaciones, estas se consideran como un parámetro constante dentro del instante del intervalo de tiempo $k - 1$ y k . Luego, el vector de estado es extendido agregando el parámetro (o perturbación) desconocido (Grewal & Andrews, 2001; Sirohi & Choi, 1996). Al ser considerado una constante, este puede ser descrito como:

$$\dot{\mathbf{d}} = 0 \quad 4.17$$

Propuesta 1

Corresponde a utilizar medidas mediciones tomadas durante el estado transiente del sistema dinámico, para ir realizando sucesivas estimaciones de la perturbación hasta llegar al estado estacionario. Como supuesto clave de esta propuesta es que dichas mediciones se pueden obtener en un tiempo corto respecto a la dinámica del sistema.

Propuesta 2

La propuesta anterior tiene un supuesto que es débil, ya que no siempre se puede contar con mediciones en un instante de tiempo breve respecto a la dinámica del sistema, o que no se puede contar con muchas

mediciones debido al costo de estas, se propone trabajar tomando en cuenta únicamente mediciones en el estado estacionario. De esta forma baja la cantidad de mediciones utilizadas.

4.3 Nomenclatura utilizada para las propuestas de estimadores de perturbación

Para los distintos estimadores de perturbaciones se usará la siguiente nomenclatura:

Tabla 4.1. Nomenclatura utilizada para referirse a los distintos estimadores de perturbación.

Nombre	Nomenclatura	Nombre	Nomenclatura
Sin Estimador	SE	Mínimos cuadrados propuesta 3	FAIR
Mínimos cuadrados propuesta 1	LS	Filtro de Kalman propuesta 1	HEKF
Mínimos cuadrados propuesta 2	LS+COV	Filtro de Kalman propuesta 2	SSKF

5. Metodología experimental

5.1 Reactor Otto Williams

El Reactor de Otto Williams es un CSTR utilizado ampliamente para estudiar los diferentes enfoques de RTO con desajuste de modelado (Forbes & Marlin, 1994; Williams & Otto, 1960; Zhang & Forbes, 2000). Este sistema consiste en un reactor continuo que es alimentado con dos fuentes de material: A y B, por medio de las corrientes F_A y F_B , respectivamente. Dentro del reactor, tres reacciones en paralelo forman cuatro componentes: C, E, G y P, según como muestra la Ecuación 5.1. Estos componentes junto con el reactivo que no reacciona salen del reactor por el fondo es una sola corriente llamada F_R

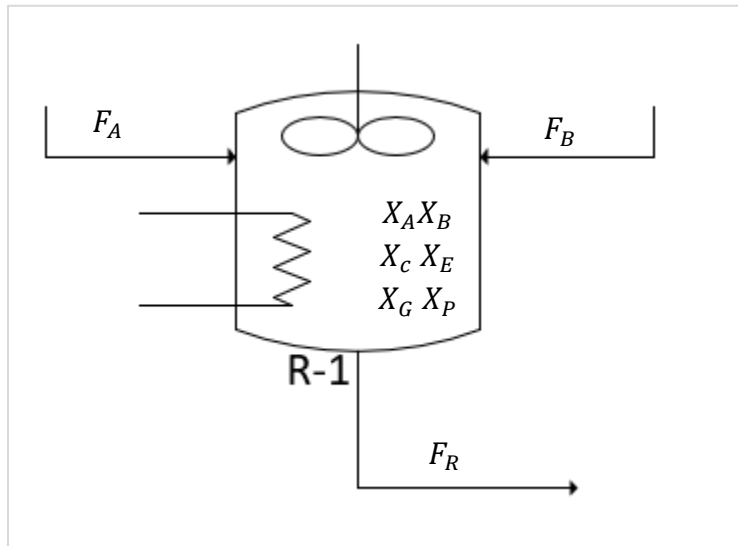


Figura 5.1. Esquema del Reactor de Otto Williams.



El sistema puede ser descrito por los balances de materia que se muestran en la Ecuación 5.2.

$$\begin{aligned}
 V_R \frac{dX_A}{dt} &= F_A - F_R X_A - V_R r_1 \\
 V_R \frac{dX_B}{dt} &= F_B - F_R X_B - V_R r_1 \frac{M_B}{M_A} - V_R r_2 \\
 V_R \frac{dX_C}{dt} &= -F_R X_C - V_R r_1 \frac{M_C}{M_A} - V_R r_2 \frac{M_C}{M_B} - V_R r_3 \\
 V_R \frac{dX_E}{dt} &= -F_R X_E - V_R r_2 \frac{M_E}{M_B}
 \end{aligned}
 \tag{5.2}$$

$$\begin{aligned}
V_R \frac{dX_G}{dt} &= -F_R X_G - V_R r_3 \frac{M_G}{M_C} \\
V_R \frac{dX_P}{dt} &= -F_R X_P - V_R r_2 \frac{M_P}{M_B} - V_R r_3 \frac{M_P}{M_C} \\
F_R &= F_A + F_B
\end{aligned}$$

Donde M_i corresponde el peso molecular del componente i, y r_j es la velocidad de reacción de la reacción química definida respecto a sus reactivos limitantes. Dado que se trata de pseudocomponentes, es necesario definir la relación entre sus pesos moleculares. Esto se puede obtener suponiendo que:

$$\frac{M_B}{M_A} = \frac{M_P}{M_B} = 1, \frac{M_C}{M_A} = \frac{M_C}{M_B} = \frac{M_E}{M_B} = 2, \frac{M_G}{M_B} = 1.5, \frac{M_P}{M_C} = 0.5 \quad 5.3$$

Las velocidades de reacción pueden ser calculadas como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}
r_1 &= k_1 X_A X_B \\
r_2 &= k_2 X_B X_C \\
r_3 &= k_3 X_C X_P
\end{aligned} \quad 5.4$$

Donde k_j corresponde a la constante cinética de reacción, la cual es obtenida usando la expresión de Arrhenius:

$$k_j = k_j^0 \exp\left(-\frac{EA_j}{T_R}\right) \quad 5.5$$

Siendo EA_j la energía de activación de la reacción j.

Como la fracción de masa del producto C es de una magnitud más baja que el resto de los componentes, es común utilizar una representación del proceso que solo considera las otras cinco especies, con el correspondiente desajuste estructural de modelado. Forbes y Marlin (1996), definieron un modelo de ejemplo del reactor de Otto Williams para ser utilizado en la optimización basada en modelos, despreciando la existencia del producto C y considerando solo dos reacciones paralelas dentro del reactor:



En estas reacciones el componente C no es representado debido a que es un producto intermediario. Este hecho implica que no será detectado en el laboratorio cuando se realicen las mediciones en el estado estacionario, siendo una fuente razonable de desajuste.

Dada esta fuente de desajuste de modelado, los balances de materia que pueden ser usados en la capa de RTO se muestra en las ecuaciones 5.7, 5.8 y 5.9.

$$\begin{aligned}
V_R \frac{dX_A}{dt} &= F_A - F_R X_A - V_R \tilde{r}_1 - V_R \tilde{r}_2 \\
V_R \frac{dX_B}{dt} &= F_B - F_R X_B - 2V_R \tilde{r}_1 - V_R \tilde{r}_2 \\
V_R \frac{dX_C}{dt} &= -F_R X_C + 2V_R \tilde{r}_1 \\
V_R \frac{dX_G}{dt} &= -F_R X_G + 3V_R \tilde{r}_2 \\
V_R \frac{dX_P}{dt} &= -F_R X_P + V_R \tilde{r}_1 - V_R \tilde{r}_2
\end{aligned} \tag{5.7}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{r}_1 &= \tilde{k}_1 X_A (X_B)^2 \\
\tilde{r}_2 &= \tilde{k}_2 X_A X_B X_P
\end{aligned} \tag{5.8}$$

$$\tilde{k}_j = \tilde{k}_j^0 \exp\left(\frac{\widetilde{E}A_j}{T_R}\right), \quad j = 1, 2 \tag{5.9}$$

Donde ($\tilde{}$) representa los parámetros del modelo con desajuste.

La optimización basada en modelos puede ser resumida como: encontrar las variables de decisión F_B y T_R dentro de un espacio factible, maximizando el beneficio, sujeto a un modelo con desajuste, correspondientes a la simulación:

$$\begin{aligned}
&\min_{F_B, T_R} -f_{Objetivo} \\
&s. t.: \\
&\text{Modelo con desajuste (Ecuación 5.7 en estado estacionario)} \\
&F_B \in [F_B^L, F_B^U] \\
&T_R \in [T_R^L, F_B^U]
\end{aligned} \tag{5.10}$$

La nomenclatura utilizada en el Reactor de Otto Williams se presenta en la siguiente tabla:

Tabla 5.1. Nomenclatura utilizada en el Reactor de Otto Williams

Variable	Descripción	Unidades
F_A, F_B	Flujo de masa de entrada de A y B	kg/s
F_R	Flujo de masa de salida	kg/s
T_R	Temperatura del reactor	K
X_i	Fracción másica del componente i	Adimensional
V_R	Holdup del reactor	kg
r_j	Velocidad de la reacción j en el proceso	$kg/(l\ s)$
$\tilde{r}_j$	Velocidad de la reacción j en el modelo	$kg/(l\ s)$
k_j	Constante cinética de la reacción j en el proceso	$kg/(l\ s)$
$\tilde{k}_j$	Constante cinética de la reacción j en el modelo	$kg/(l\ s)$
k_j^0	Constante cinética en la expresión de Arrhenius para reacción j en el proceso	$kg/(l\ s)$
$\tilde{k}_j^0$	Constante cinética en la expresión de Arrhenius para reacción j en el modelo	$kg/(l\ s)$
EA_j	Energía de activación en la expresión de Arrhenius para reacción j en el proceso	K
$\widetilde{EA}_j$	Energía de activación en la expresión de Arrhenius para reacción j en el modelo	K
F_B^L, F_B^U	Límites para F_B	kg/s
T_R^L, T_R^U	Límites para T_R	K

Los valores de los parámetros utilizados en las ecuaciones antes descritas se resumen en la siguiente tabla:

Tabla 5.2. Valores de los parámetros utilizados en el Reactor de Otto Williams (Navia, 2013)

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
F_A	1.8725	$\widetilde{EA}_1$	-8077
V_R	2105	$\widetilde{EA}_2$	-12438.5
k_1^0	1.6599×10^6	F_B^L	3
k_2^0	7.2177×10^8	F_B^U	6
k_3^0	2.6745×10^{12}	T_R^L	343
EA_1	-6666.7	F_B^U	373
EA_2	-8333.3	P_P	1143.38
EA_3	-11111	P_E	25.92
$\tilde{k}_1$	1.655×10^6	C_A	76.23
$\tilde{k}_2$	2.611×10^{13}	C_B	114.34

5.2 Función Objetivo

El objetivo operacional de este sistema es maximizar la ganancia en el estado estacionario del reactor. Este objetivo puede ser expresado como una función de los caudales de los componentes:

$$f_{\text{Objetivo}} := F_R(X_P P_P + X_E P_E) - F_A X_A C_A - F_B X_B C_B \quad 5.11$$

Siendo P_j el precio del producto j y C_i el costo de la materia prima i . Para alcanzar el objetivo operacional, el sistema puede modificar el caudal F_B y la temperatura del reactor T_R por medio de un sistema de calefacción/refrigeración.

5.3 Restricciones

Se consideran restricciones de carácter operacional, asignándole un límite a la concentración del compuesto A y al compuesto G (Rodríguez-Blanco, Sarabia, Navia, & de Prada, 2017):

$$\begin{aligned} X_A &\leq \text{Límite}_{upA} \\ X_G &\leq \text{Límite}_{upG} \end{aligned} \quad 5.12$$

Siendo $\text{Límite}_{upA} = 0.085$ y $\text{Límite}_{upG} = 0.105$.

5.4 Simulador de perturbaciones

Para la inclusión de perturbaciones en el Reactor de Otto Williams se define una fluctuación en el flujo del componente A ya que, al estar presente en la función objetivo del problema de optimización, y afectar al tiempo de residencia del reactor, variaciones en esta variable provocarían un cambio el óptimo del sistema. Primero se realizó un análisis de sensibilidad para saber cómo las variaciones de este flujo afectan a las variables de decisión (Flujo de B y Temperatura del reactor). A continuación, se presenta la Figura 5.2, donde se puede ver la variación del valor óptimo de las variables de decisión del proceso, en función del porcentaje de cambio del flujo de A.

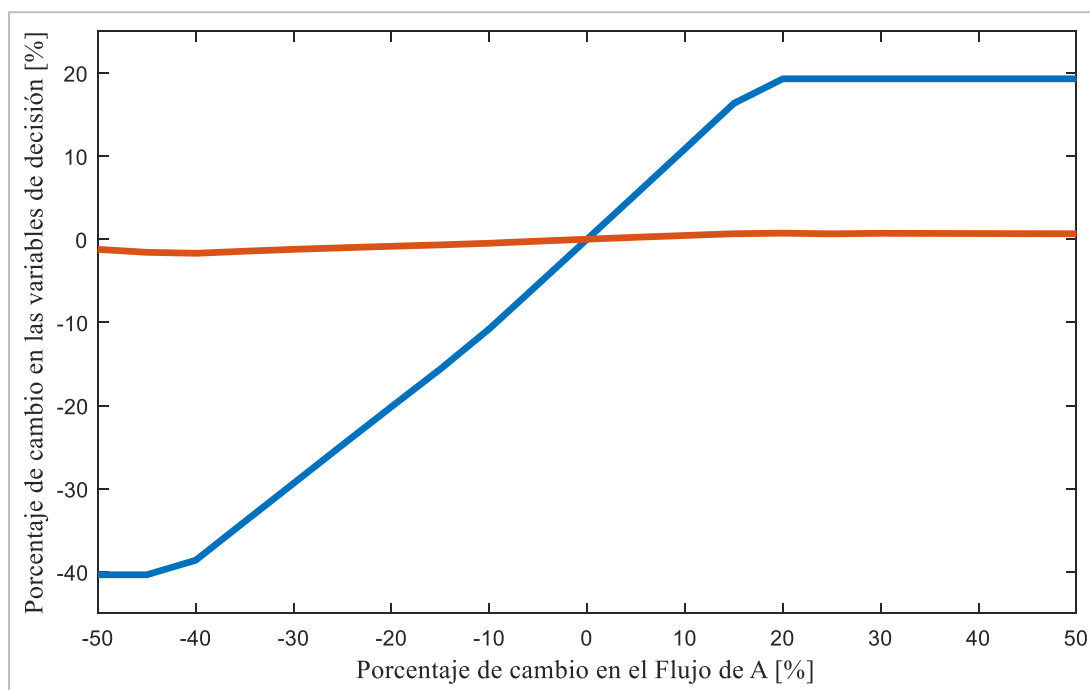


Figura 5.2. Porcentaje de cambio en las variables de decisión óptimas.

En la Figura 5.2, se puede observar que las variables de decisión que optimizan el proceso se ven afectadas con cambios entre un -45% y un 20% respecto al valor nominal del flujo de A. Esto provoca cambio de hasta un -40% y un 20% en el flujo de B que optimiza el proceso. Respecto a la temperatura del reactor, se observa una tasa de cambio menor, cercanas al -2% y al 1%. Basado en estos resultados, se define para las perturbaciones en el flujo de A un límite inferior de 1.0299 kg/s y uno superior de 2.2470 kg/s .

En primera instancia se trabajará con perturbaciones tipo escalón, donde se aumentará el valor de F_A en una tasa del 5% hasta llegar al valor a su límite superior. Una vez alcanzado este valor se disminuirá este flujo también a una tasa del 5% hasta llega límite inferior, para finalmente volver a llevar esta corriente a su valor cercano al nominal. En Figura 5.3 se presenta una representación de la perturbación simulada.

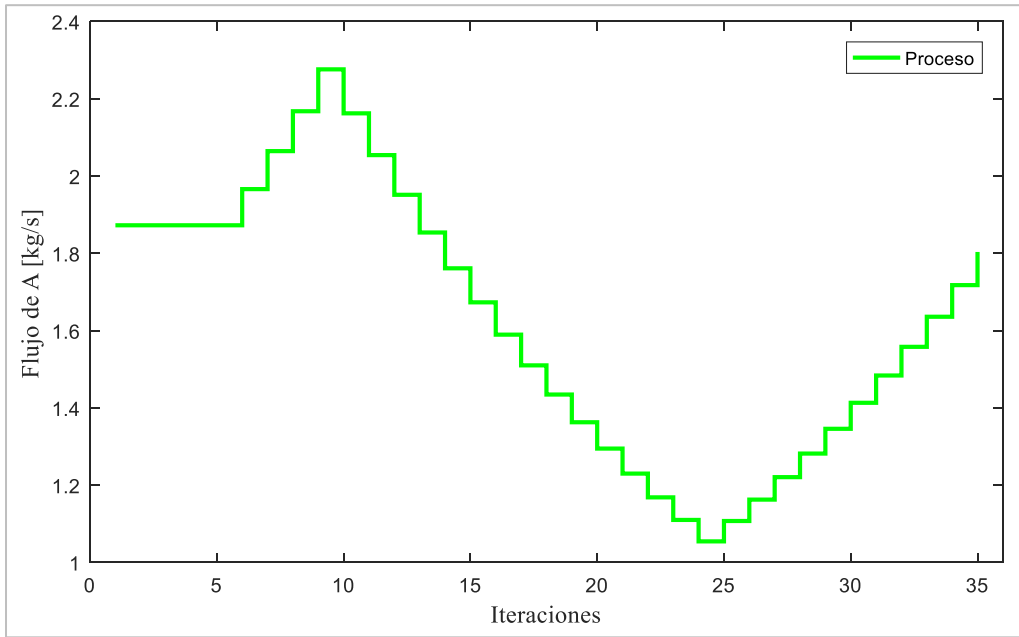


Figura 5.3. Perturbación tipo escalón para el flujo de A en [kg/s].

Es esperable que las perturbaciones tengan una autocorrelación, es decir, que dependan de valores previos debido a que estos vienen de equipos o procesos anteriores al que se desea optimizar. Adicionalmente, estos pueden presentar estacionalidad o un comportamiento cíclico que se repite con determinada frecuencia, a causa por ejemplo de turnos de operarios, además de una componente estocástica. Para poder modelar este comportamiento en F_A se utiliza una función ARIMA (ver anexo A). De simulaciones previas se define trabajar con una función ARIMA (1,0,2), de esta forma se le dará una variación más real al flujo de A. Esta función tendrá como límites los mismos valores de máximo y mínimo que la perturbación escalón.

Dados los valores entregados al modelo ARIMA, este puede generar distintas realizaciones de las perturbaciones que puede seguir los valores del flujo de A. Con lo anterior y para tener un mayor número de pruebas, se define trabajar con hasta cuatro realizaciones distintas de las que puede generar este modelo. A continuación, se presenta una de las realizaciones la cual será llamada “Camino 1”

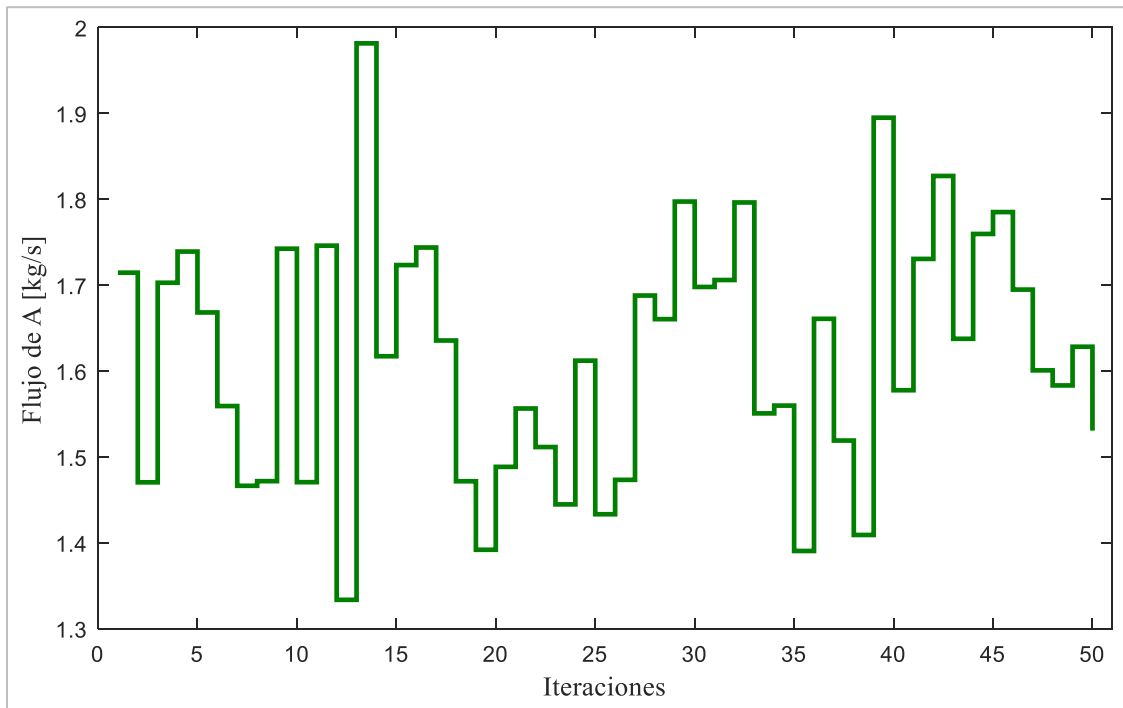


Figura 5.4 Perturbación generada en el flujo de A utilizando la función ARIMA (1,0,2)

La Figura 5.4 representa unos de los cuatro caminos generados por la función ARIMA para ser utilizados en la RTO. Todos los caminos pueden ser revisados en la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** de los anexos.

6. Resultados

Las perturbaciones estudiadas fueron implementadas a distintas frecuencias de cambio, teniendo como referencia la ejecución de un ciclo de RTO. Se estudian los casos donde se esperan desde uno a seis ciclos de RTO para efectuar una perturbación en el valor del flujo de A. Como se utiliza una metodología basada en gradientes, es de esperar que mientras más ciclos de RTO sucedan entre el cambio de las perturbaciones, los gradientes del proceso puedan ser mejor estimados, ya que una menor variación considera menos influencia de las perturbaciones en la Ecuación 3.1. Para comparar los resultados en cada subsección se comenzará mostrando el comportamiento de la Optimización en Tiempo Real con Adaptación de Modificadores Dual sin la incorporación de estimadores, para luego dar paso a una comparación entre todas las metodologías de estimación, tanto en la determinación del valor de F_A , como en las variables de decisión obtenidas y el efecto que tiene en la estimación del beneficio óptimo.

6.1 Evaluación de los resultados

Para llevar a cabo la comparación de los resultados entre las distintas metodologías de estimación de perturbaciones se define un parámetro de comparación entre las variables de decisión obtenidas por el modelo y las correspondientes al proceso. Este parámetro corresponde al error porcentual entre ambos resultados, según como lo define la Ecuación 6.1:

$$\%error = \frac{(u_{p,i}^* - u_i^*)}{u_p^*} \cdot 100 \quad 6.1$$

Siendo $u_{p,i}^*$ el valor de la variable de decisión i obtenida de la optimización del proceso y u_i^* el valor de la variable de decisión i obtenida de la optimización del modelo.

También se graficarán $u_{p,i}^*$ y u_i^* para poder comparar el comportamiento de la variable obtenida por el modelo y como esta se comporta a lo largo de las iteraciones. Para evaluar la trayectoria que sigue el beneficio obtenido al aplicar las variables de decisión que optimizan el proceso, se aplica la Ecuación 6.2

$$Beneficio = -función\ objetivo. \quad 6.2$$

Adicionalmente se graficarán las composiciones de los compuestas A y G junto con sus respectivas restricciones (Ecuación 5.12), para poder verificar si el sistema sigue un camino factible en la búsqueda del óptimo.

6.2 Consideraciones en los distintos estimadores de perturbaciones

En el caso de LS se consideró una ventana móvil de 2, esto quiere decir que se toman los datos del instante k y $k - 1$, para la obtención de la perturbación, con lo que se obtiene como resultado la estimación de F_A en ambos instantes de tiempo. De esta manera se puede ir corrigiendo la predicción anterior con el fin de mejorar la estimación de los gradientes.

Para LS+COV se consideró una ventana móvil de 2, tanto para la estimación de F_A , como para los parámetros del modelo, en otras palabras, se toman los datos del instante k y $k - 1$. Con esto se puede corregir tanto el valor de F_A como el de los parámetros utilizados. Los parámetros son actualizados cada 3 ciclos de la RTO, ya que pueden ser considerados constantes una cierta cantidad de iteraciones.

En FAIR se considera un valor de 0.5 para la constante C de la Ecuación 4.9.

Para HEKF, dado que se trata de un problema de simulación, las covarianzas de modelo Q y de medición R deben sintonizadas para la conveniencia del estimador. Para esto se realizaron simulaciones previas y así obtener ambos valores, llegando a un valor de $Q = 0.095$ y $R = 0.01$. Al tratarse de un problema de simulación ambos valores serán considerados constantes durante todo el proceso ya que no hay forma de establecer una relación real con las mediciones o con la simulación y el proceso (Simon, 2006).

Al igual que en HEKF, como se trata de un problema de simulación, las covarianzas de modelo Q y de medición R son sintonizadas para la conveniencia del estimador. Se utilizaron los mismos valores obtenidos para HEKF las cuales también serán considerados constantes durante todo el proceso.

6.3 Implementación de estimadores

Para incluir los distintos estimadores de perturbaciones, es necesario agregar una nueva etapa de estimación en el algoritmo de la RTO con adaptación de modificadores dual. En la Figura 6.1 se esquematiza lo antes mencionado:

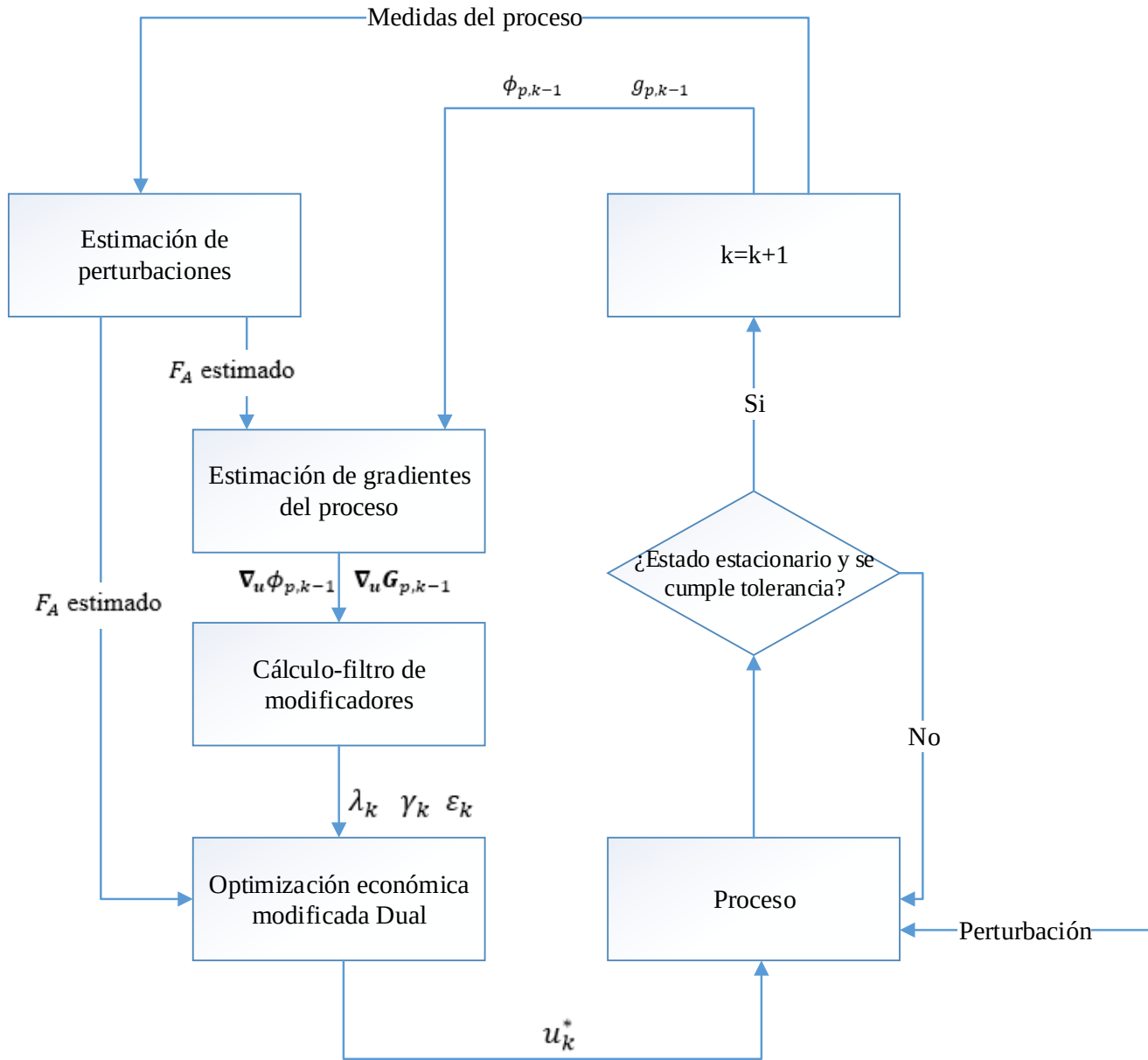


Figura 6.1 Algoritmo para MA Dual con etapa de estimación de perturbaciones.

Para el caso de LS+COV la etapa de estimación de perturbaciones además de informa el flujo de A estimado, entrega nuevos parámetros para el modelo. Esta nueva etapa de estimación de perturbaciones correspondería a la identificación del sistema.

6.4 Simulación con perturbaciones tipo escalón

6.4.1 Cada 1 ciclo de RTO

Primero se realizó perturbaciones tipo escalón. Es de esperar que al ser un tipo de perturbación que tiene una tendencia definida favorezca la estimación de los gradientes del proceso y del modelo. A continuación se presenta el comportamiento de la RTO sin la inclusión de estimadores de perturbación obteniendo los resultados que se resumen en Figura 6.2 para las variables de decisión y la Figura 6.3 para el beneficio obtenido:

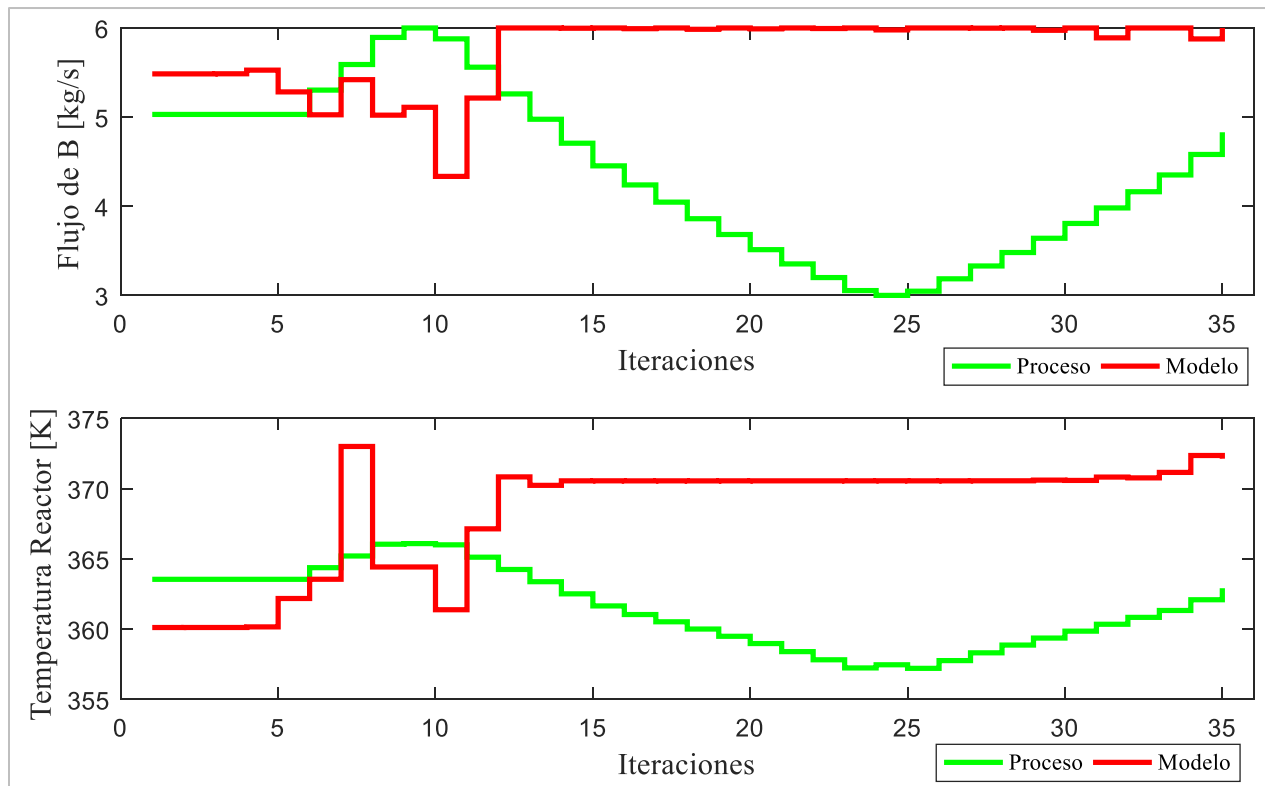


Figura 6.2. Evolución de las variables de decisión (rojo) y las variables de decisiones óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo.

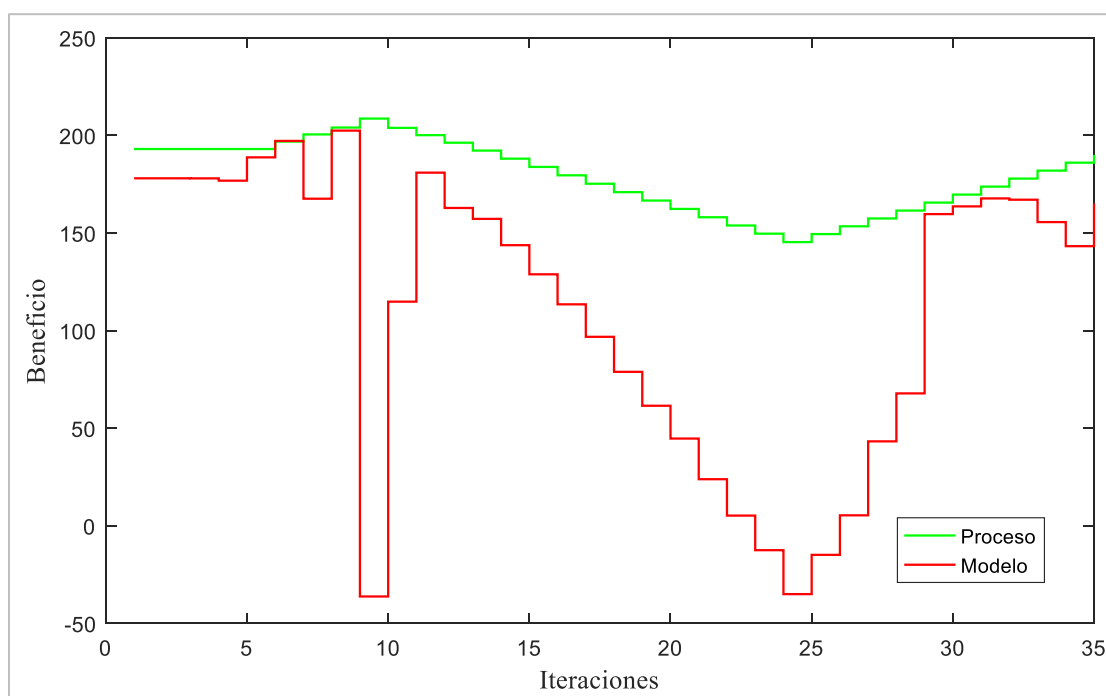


Figura 6.3. Evolución del beneficio al aplicar las variables de decisión obtenidas del modelo (rojo) y las variables de decisiones óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo.

En la Figura 6.2 se puede observar que la metodología Dual no logra seguir la trayectoria de las variables de decisión que optimizan el proceso, quedando fija durante varias iteraciones. Este comportamiento se obtiene ya que se utiliza información de los $n_u + 1$ estados previos obtenidos por la RTO (para este caso 3 estados previos), los que tuvieron valores distintos de flujo de A, con lo que el gradiente obtenido no es representativo del proceso. Además, se debe considerar que al utilizar la Ecuación 2.16 se le atribuye todo el cambio del proceso al efecto de las variables de decisión, lo que no es cierto ya que como el Flujo de A cambia constantemente, también afecta a los resultados en el proceso. Es por todo lo anterior que el gradiente está mal estimado, afectando el desempeño de la RTO.

En la Figura 6.3 se muestra que al aplicar las variables de decisión que optimizan el proceso obtenidas por la RTO, el beneficio obtenido no sigue al óptimo del proceso, subestimándolo durante la mayoría de las iteraciones, llegando incluso a tener valores negativos. Estos coinciden cuando las variables de decisión quedan estancadas y solo se tiene una mejora porque la variación que tiene el flujo de A luego de llegar a su mínimo sube acercando el óptimo del proceso al modelo, pero no por efecto de la metodología aplicada.

Respecto a composiciones másicas, en la Figura 6.4 se muestra su evolución a lo largo de las iteraciones del compuesto A y G junto con su respectiva restricción:

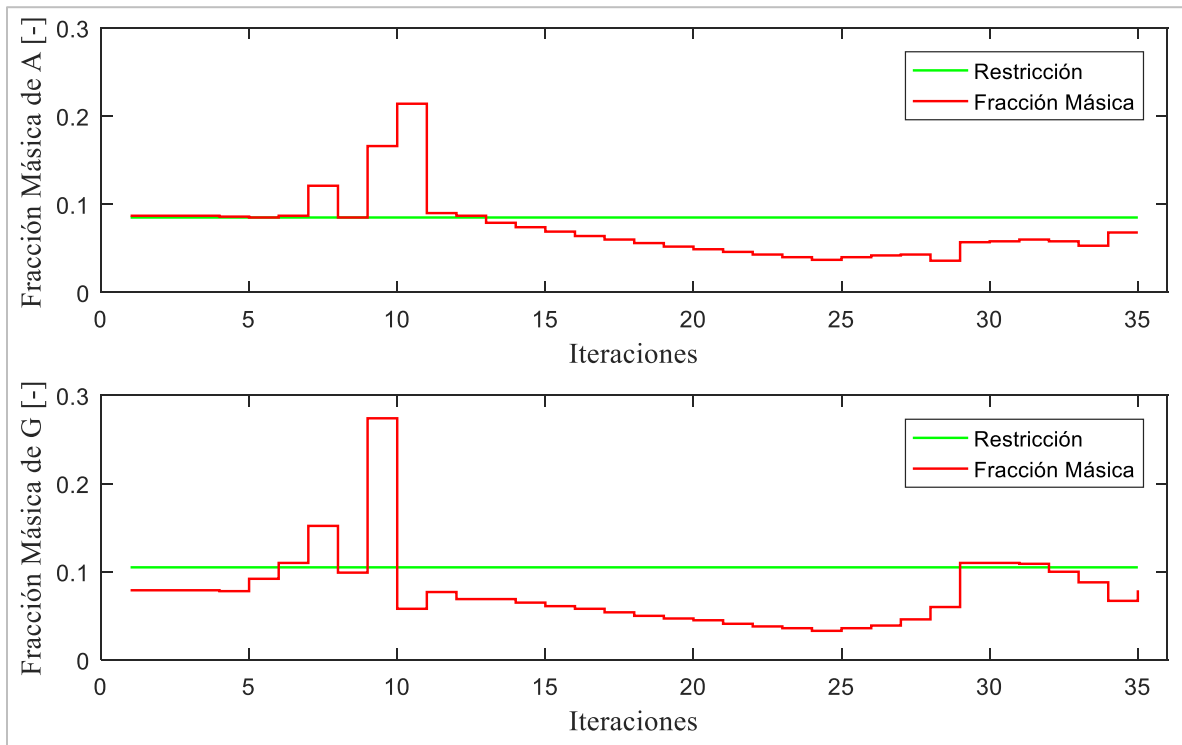


Figura 6.4. Evolución de las variables fracciones másicas (rojo) y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo.

En la Figura 6.4 se observa que en un principio los valores óptimos calculados por la RTO al ser aplicados al proceso se obtienen composiciones que sobrepasan sus límites establecidos, lo que sería un camino infactible operacionalmente. Esto podría tener relación con las variables de decisión que optimizan al proceso obtenidas por la RTO ya que no logran seguir la misma trayectoria que las del proceso real. También se debe considerar que la restricción dual reduce la región factible de las soluciones obtenidas por la RTO, acotando las soluciones del modelo a puntos que sobrepasan las restricciones al ser aplicadas al proceso. Esto se debería a que las metodologías basadas en gradientes no garantizan factibilidad en las ejecuciones intermedias hasta llegar al óptimo de la planta o proceso.

A continuación, se presentan la Figura 6.5 y Figura 6.6, las cuales muestran la comparación en la estimación de la perturbación en F_A y de las variables de decisión 1, respectivamente, al aplicar las distintas metodologías de estimación de perturbaciones.

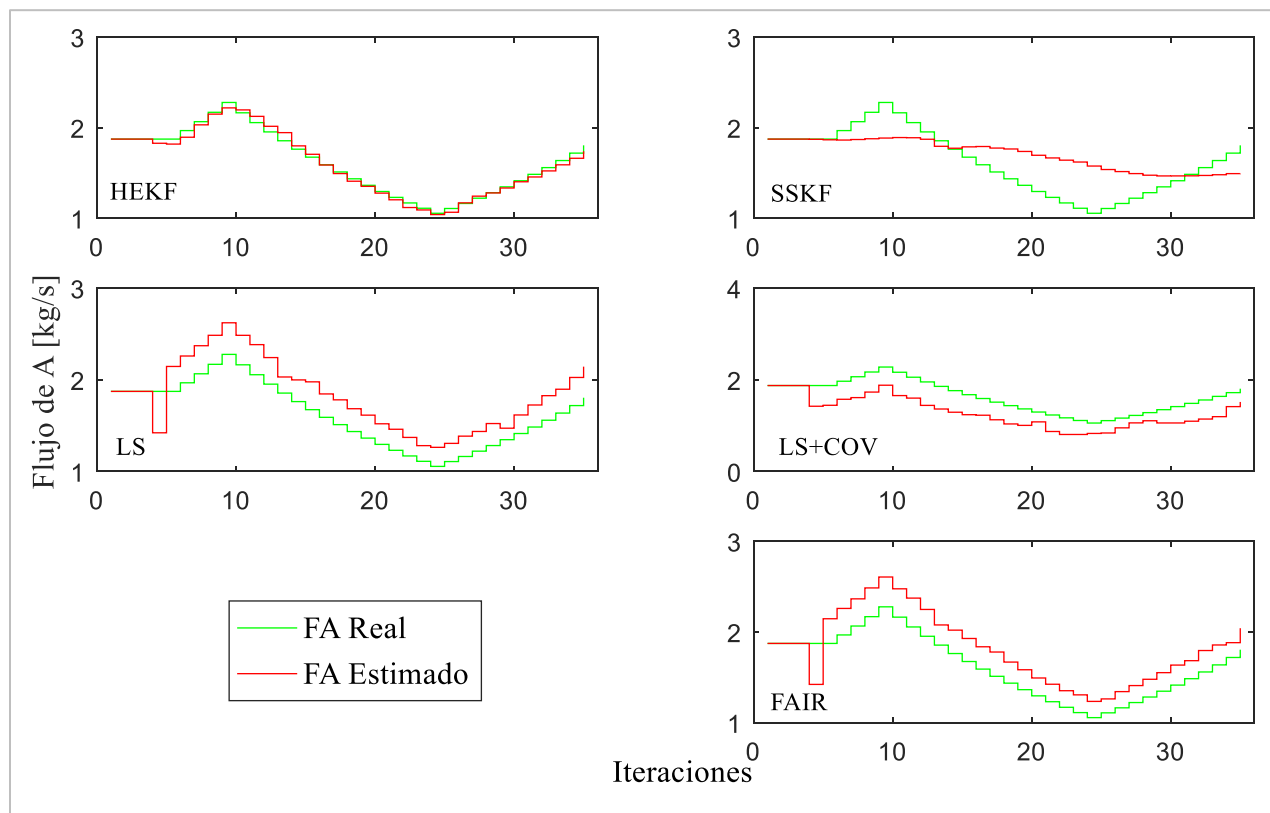


Figura 6.5. Comparación del valor estimado para F_A [kg/s] obtenido con los distintos estimadores de perturbaciones, cada 1 ciclo de RTO.

Respecto a la Figura 6.5, al comparar HHEK con SSKF se observa que el primero puede estimar mucho mejor la perturbación, lo cual es de esperar, considerando que cuenta con una mayor cantidad de mediciones para poder estimar la perturbación. Respecto a las otras tres metodologías se observa que, si bien la estimación tiene un comportamiento similar al valor real, este es sobreestimado en LS y FAIR ya que en simulaciones realizadas con anterioridad se determinó que es necesario un valor mayor del flujo de A para obtener composiciones similares entre el proceso y el modelo; y subestimado en LS+COV, ya que como adicionalmente modifica los parámetros del modelo necesitaría un valor menor para el flujo de A para obtener resultados similares entre el proceso y el modelo. Si bien para actualizar el valor en el modelo puede provocar cambios en la detección de su óptimo, su comportamiento similar debería permitir obtener una buena aproximación de la tasa de cambio y a su vez la estimación de los gradientes del sistema.

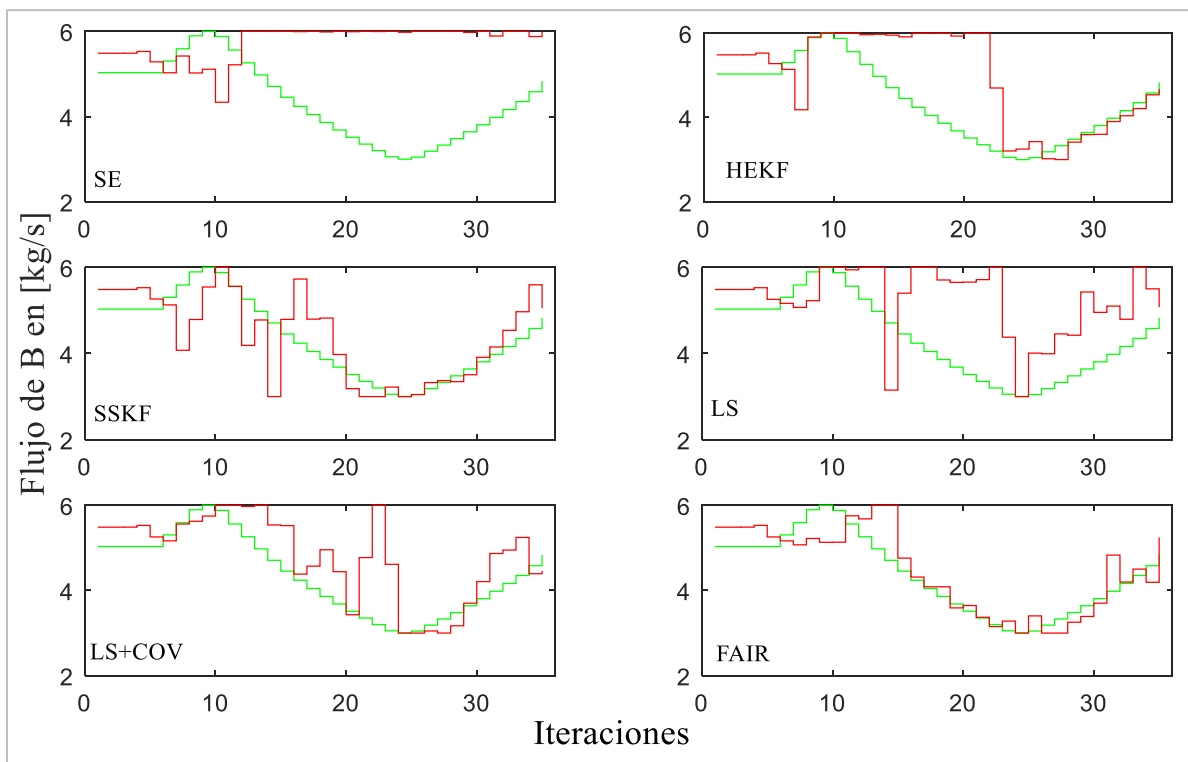


Figura 6.6. Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.

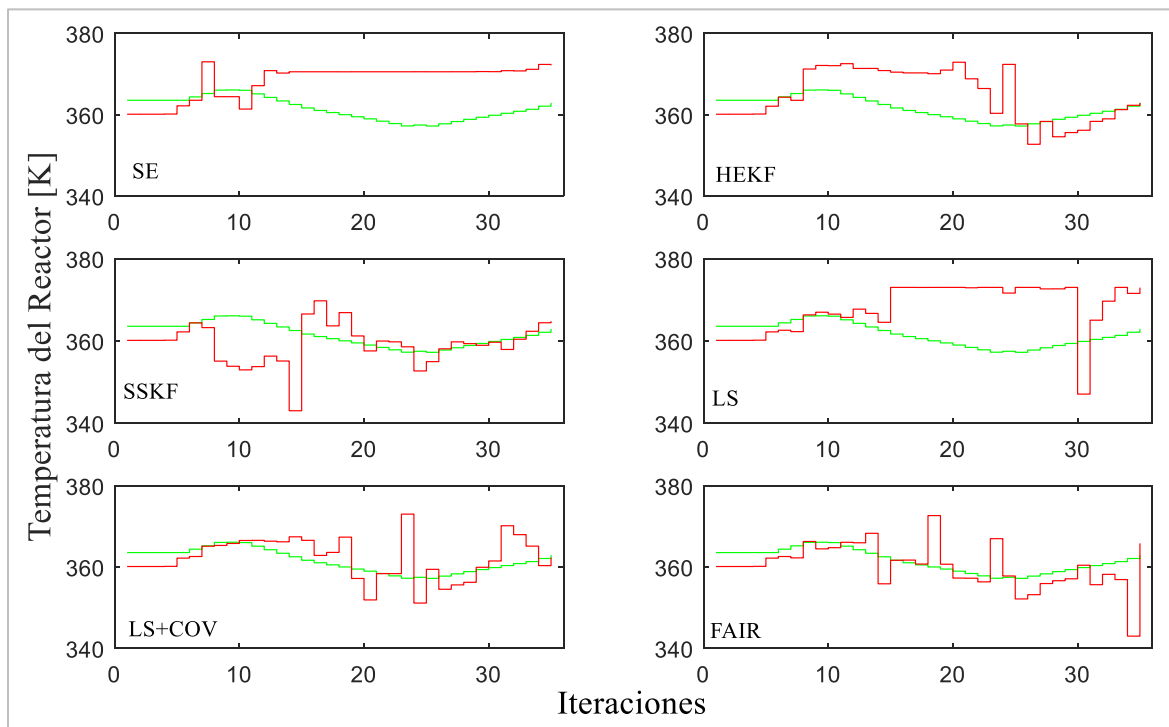


Figura 6.7. Comparación de la variable de decisión 2 (temperatura del Reactor) obtenida al incluir las distintas metodologías de estimación de perturbaciones incluidas cada 1 ciclo de RTO.

En la Figura 6.6 y la Figura 6.7 en forma general se puede observar que al aplicar el estimador de perturbaciones mejora la obtención de las variables de decisión en ciertos pasajes de las iteraciones, no quedando en valores fijos a lo largo de muchas iteraciones. Esto se debe que al utilizar la Ecuación 3.1, los gradientes son estimados atribuyendo los cambios en el proceso a las variables de decisión y la perturbación, mejorando el resultado obtenido.

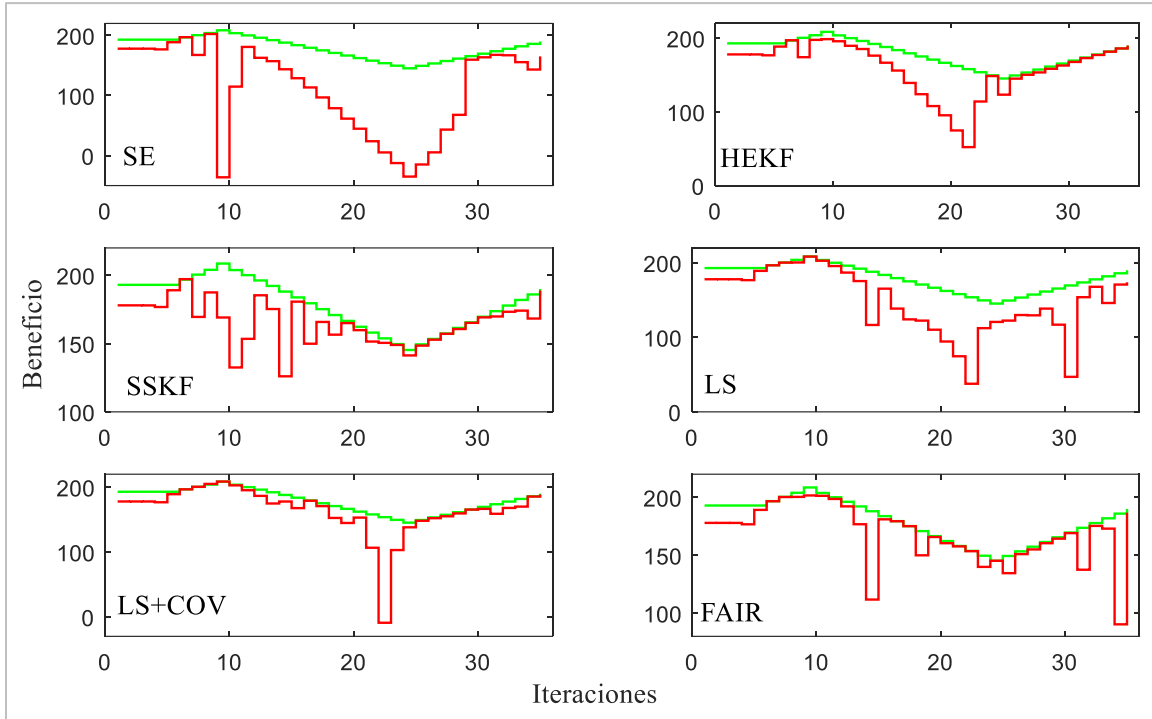


Figura 6.8. Comparación del beneficio obtenido por las diferentes propuestas al aplicar las variables de decisión obtenidas del modelo (rojo) y las variables de decisiones óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo.

En la Figura 6.8 se puede observar que, si bien HEKF presenta la mejor estimación, no es el que mejora en mayor medida a la metodología MA Dual. El que presenta un mejor resultado corresponde a la propuesta FAIR en ambas variables y su respectivo beneficio obtenido. Esto se debería a dos factores: Primero a que la tasa de cambio en el valor estimado de F_A es similar al real con lo que el gradiente obtenido utilizando esta información debe ser una buena aproximación del real, parecido a lo que se presentaría con HEKF. Como segundo factor se debe considerar que el valor estimado de F_A con FAIR permite que los resultados obtenidos por el modelo se asemejen a los del proceso. Lo anterior se demostró en simulaciones realizadas con anterioridad en las cuales, para obtener composiciones similares entre el proceso y el modelo utilizado, era necesario aplicar un valor mayor de F_A al modelo, que es lo que ocurre con la función FAIR. Esta propuesta obtiene estos resultados ya que como se observa, la Ecuación 4.9 al tener unos residuos pequeños (ya que se trabaja con fracciones molares) se asemeja a la función de mínimos cuadrados ordinaria, resultado en un comportamiento similar a lo esperado en LS, pero con una mejor estimación debido a sus propiedades. La suma de estos dos factores le permite a la propuesta FAIR tener un mejor desempeño.

Al comparar los errores promedios obtenidos se obtiene la Tabla 6.1

Tabla 6.1. Comparación de los errores promedios en la estimación de las perturbaciones y de las variables de decisión

Metodología	$F_A\%$	$F_B\%$	$T_{Rr}\%$
SE	-	42,61	2,30
HEKF	2,14	18,21	1,48
SSKF	16,55	10,20	1,18
LS	16,43	26,27	2,36
LS+COV	23,03	14,22	0,91
FAIR	15,19	7,68	0,93

En esta Tabla 6.1 se puede observar que, con la inclusión de los estimadores de perturbación, en todos los casos se logra una mejora respecto al caso SE para el flujo de B teniendo el menor error FAIR, lo que es consecuente con lo visto en la Figura 6.6. Algo similar ocurre para la obtención de la temperatura de reactor con excepción de LS, pero con un porcentaje de error promedio similar a SE. Sin embargo, para este caso se tiene que el menor error es para LS+COV por sobre FAIR. Con todo lo anterior, se puede afirmar que, con la inclusión de un estimador de perturbaciones, el rendimiento promedio de la RTO con MA Dual mejora para esta frecuencia de cambio en la perturbación de F_A .

La Figura 6.9 y Figura 6.10 muestran la evolución de las restricciones correspondientes a las fracciones molares máximas para los componentes A y G:

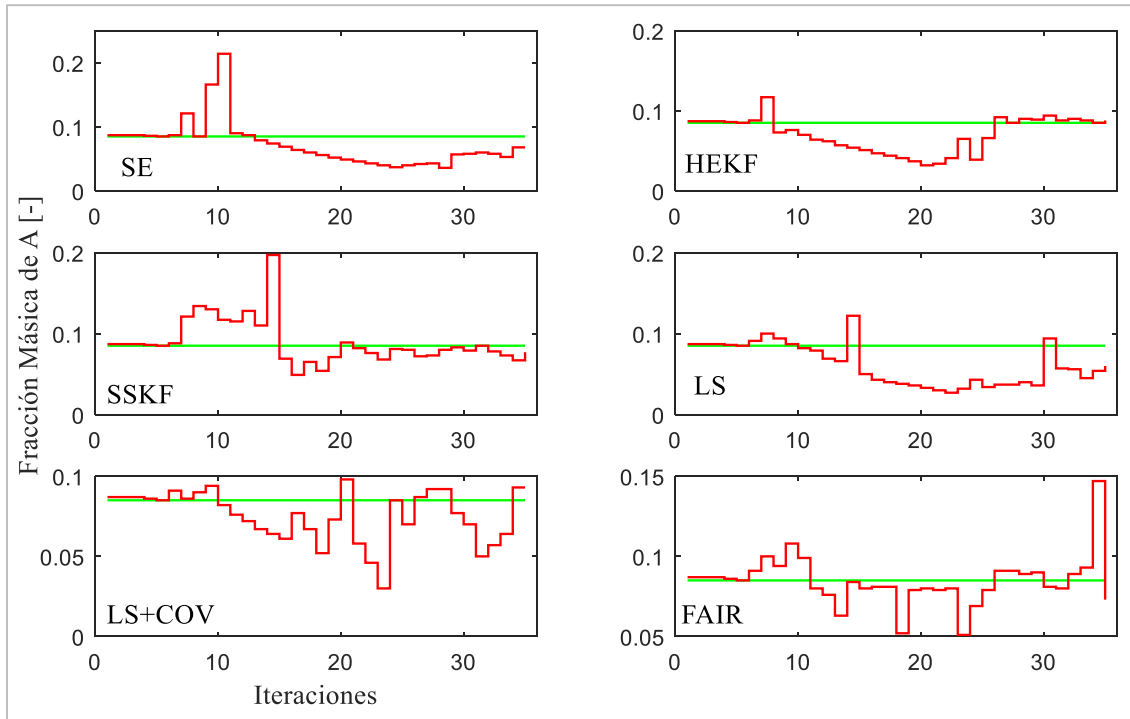


Figura 6.9. Comparación de la evolución de la fracción másicas de A (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo.

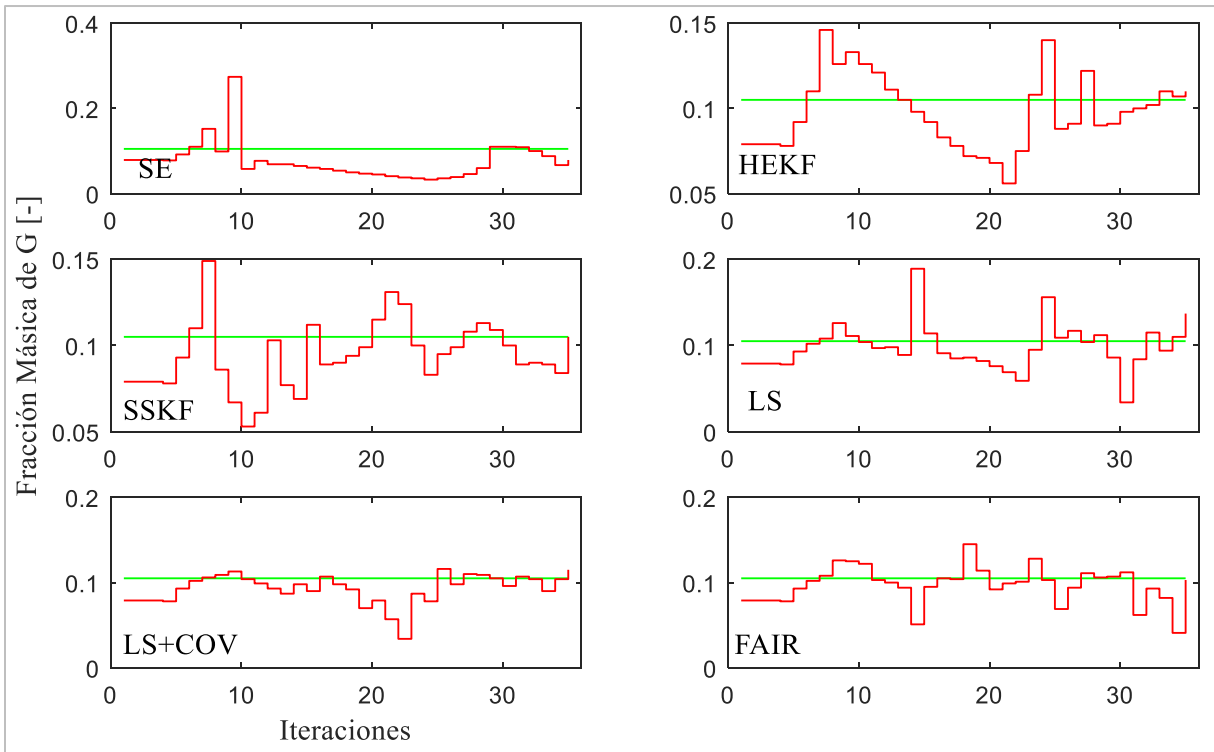


Figura 6.10. Comparación de la evolución de la fracción másicas de G (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo.

En ambas figuras se observa que si bien la inclusión de los estimadores mejora la obtención de las variables de decisión que optimizan al proceso como en el caso de FAIR, no se mejora el cumplimiento de las restricciones en la fracción másica de los componentes A y G, aumentando incluso la cantidad de veces en las que se sobrepasa el límite establecido en la Ecuación 5.12. Lo anterior se podría deber al valor de la restricción dual, ya que como ahora se utiliza una mayor cantidad de información para estimar los gradientes del proceso con la Ecuación 3.1, se necesitaría un menor grado de excitación en el sistema para un correcto cálculo del gradiente. En otras palabras, al utilizar mayor información para la obtención del gradiente, el valor utilizado para la restricción podría sobreexcitar el sistema, provocando que se siga una trayectoria infactible hacia el óptimo del sistema. Para comprobar esta idea se puede realizar una nueva simulación, pero con un valor más pequeño para la restricción dual.

6.4.2 Cada 2 ciclos de RTO

Para este caso, como la frecuencia de cambio de F_A es más lenta respecto a la RTO, el desempeño de la RTO con MA Dual mejora, con lo que la evolución de las variables de decisión obtenidas del modelo modificado se parece más a las del que optimizan el proceso. A continuación, se presenta la Figura 6.11 que muestra la evolución de las variables de decisión y la Figura 6.12 presenta el beneficio obtenido al aplicar las variables de decisión obtenidas:

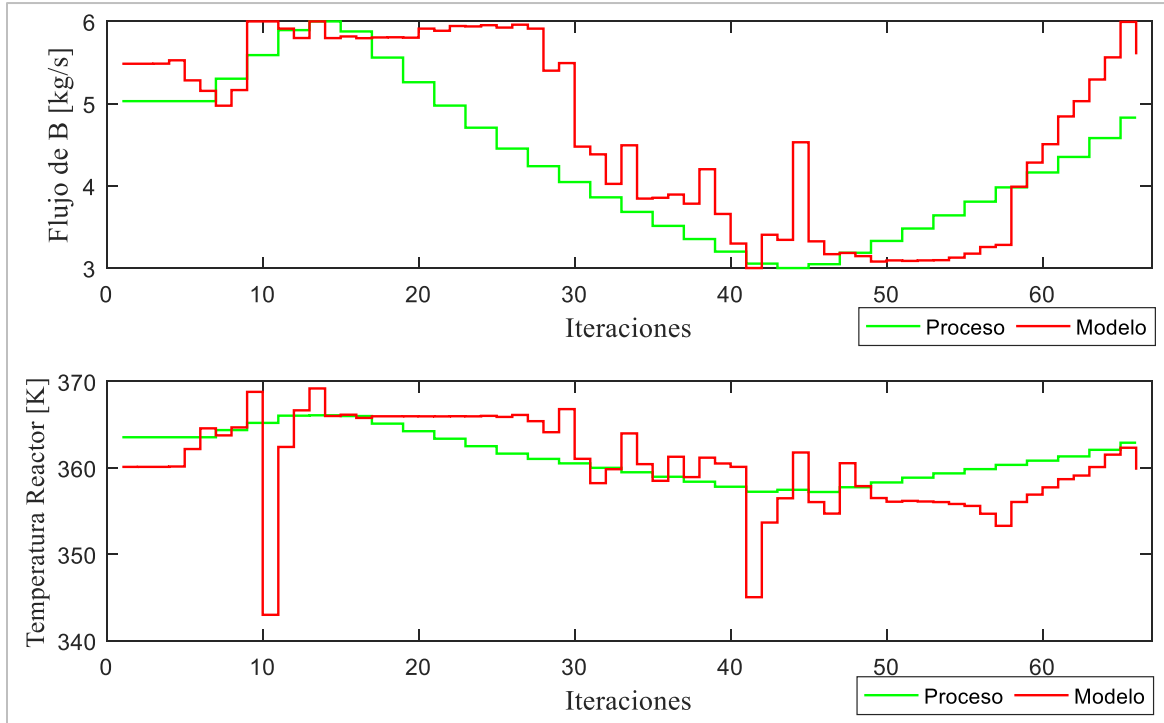


Figura 6.11. Evolución de las variables de decisión (rojo) y las variables de decisiones óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclos.

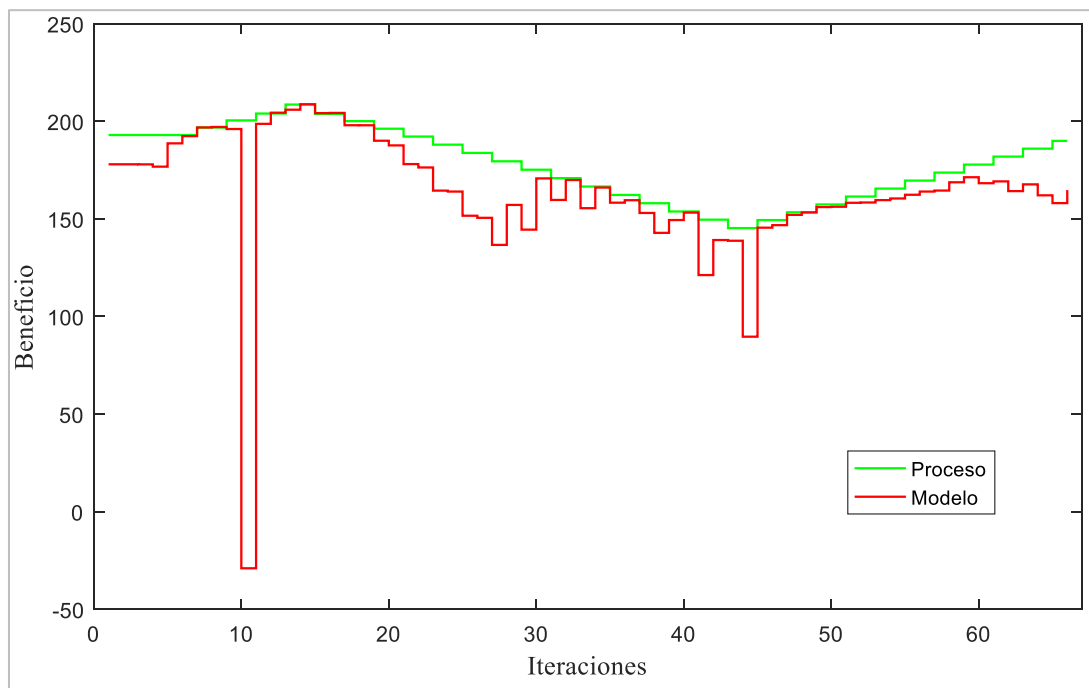


Figura 6.12. Evolución del beneficio al aplicar las variables de decisión obtenidas del modelo (rojo) y las variables de decisiones óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclo.

Se puede observar que al tener una mayor cantidad de iteraciones entre perturbaciones la metodología de MA mejora respecto al caso anterior, debido a que se cuenta con una mayor cantidad de información pasada con el mismo valor del flujo de A, permitiendo una mejor estimación de los gradientes. Además, da indicios que, si las perturbaciones tienen una tasa de cambio superior a la ejecución de la RTO, la metodología de MA puede ser capaz de sobreponerse a los cambios en las condiciones de operación provocadas por las perturbaciones. Esto sería importante, ya que para estos casos no sería necesario incluir un estimador de perturbaciones.

A continuación, se presenta la Figura 6.13, con la evolución de las fracciones másicas de los componentes A y G, junto con su respectiva restricción:

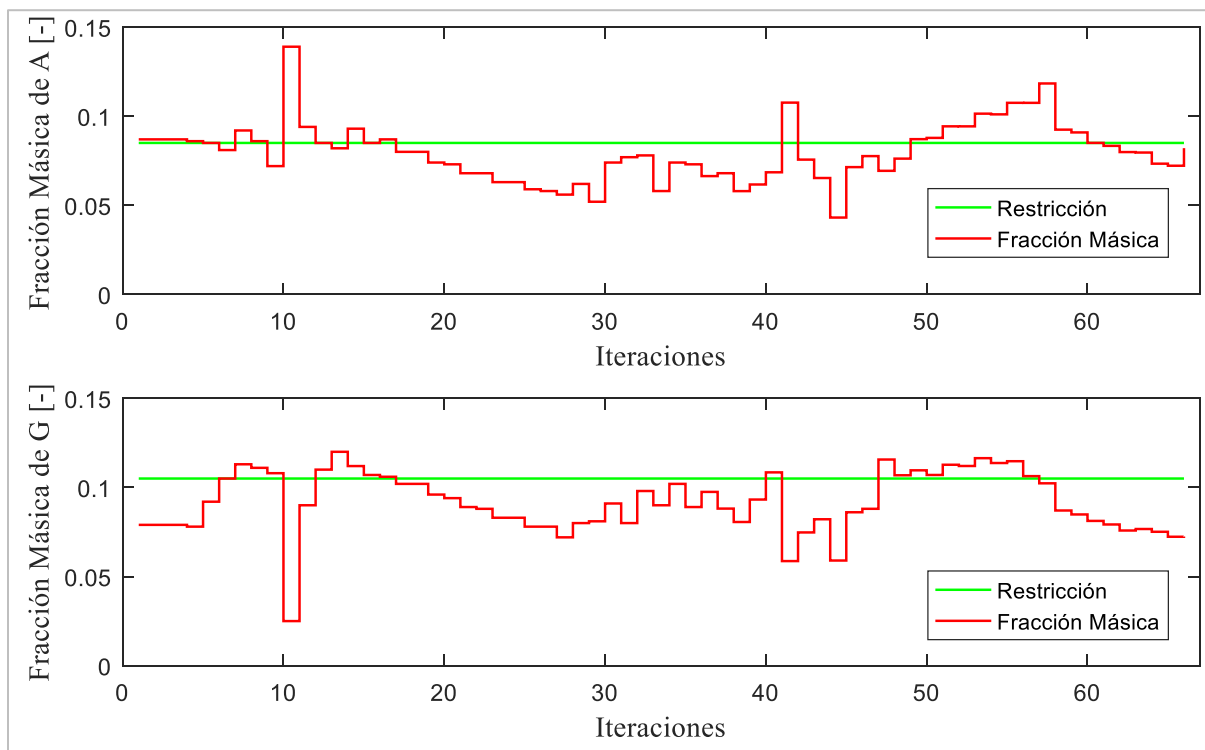


Figura 6.13. Evolución de las fracciones másicas (rojo) y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclo.

En la figura anterior se puede observar que, si bien la obtención de las variables de decisión que optimizan el modelo mejora, aún se tienen puntos infactibles que infringen las restricciones operacionales. Como ahora se cuenta con una mayor cantidad de iteraciones totales, es de esperar más cantidad de puntos infactibles en comparación con lo obtenido en la Figura XX.

En la Figura 6.14, se muestran las estimaciones realizadas por las propuestas de estimadores de perturbación, seguido de la Figura 6.15, que compara los resultados en las variable de decisión 1 al incluir las estimaciones realizadas.

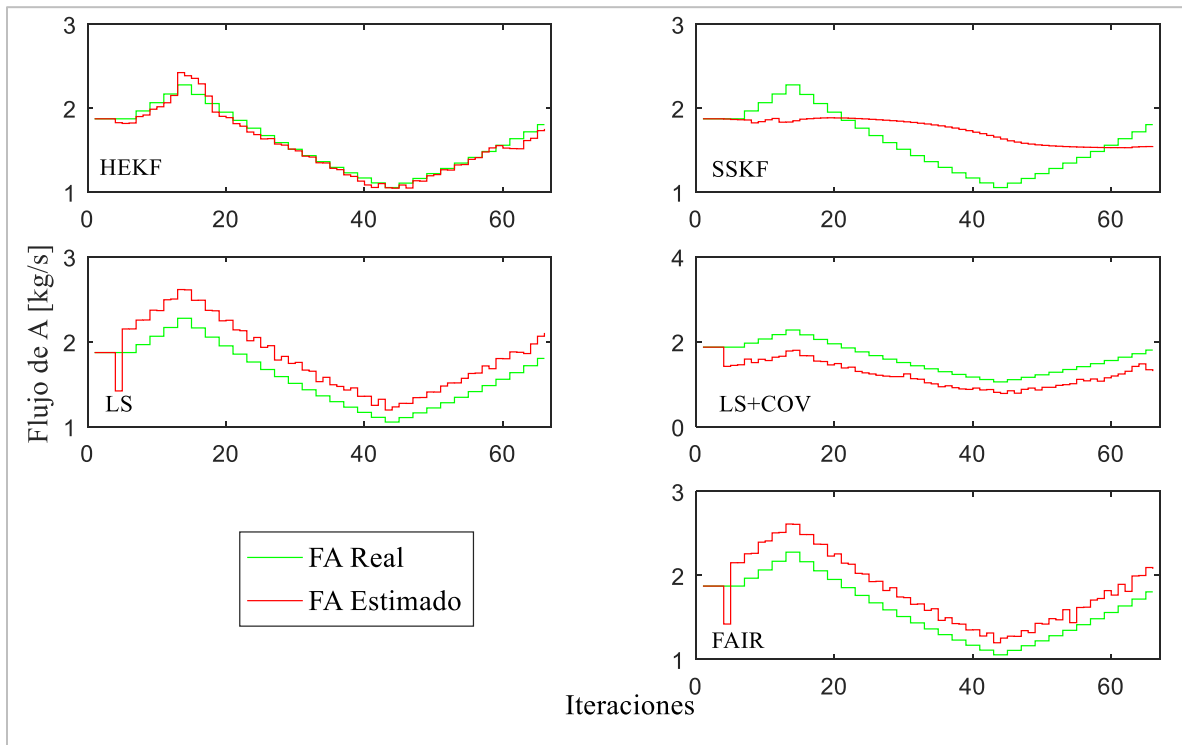


Figura 6.14. Comparación de del valor estimado para F_A obtenida con los distintos estimadores de perturbaciones, cada 2 ciclo de RTO.

En la figura anterior se observa que los resultados obtenidos son similares al caso anterior, donde el mejor estimador sigue siendo HEKF. LS y FAIR siguen sobreestimando el flujo de A y LS+COV lo subestima. Con excepción de SSKF, todas las metodologías logran seguir la misma tendencia que los valores óptimos del proceso.

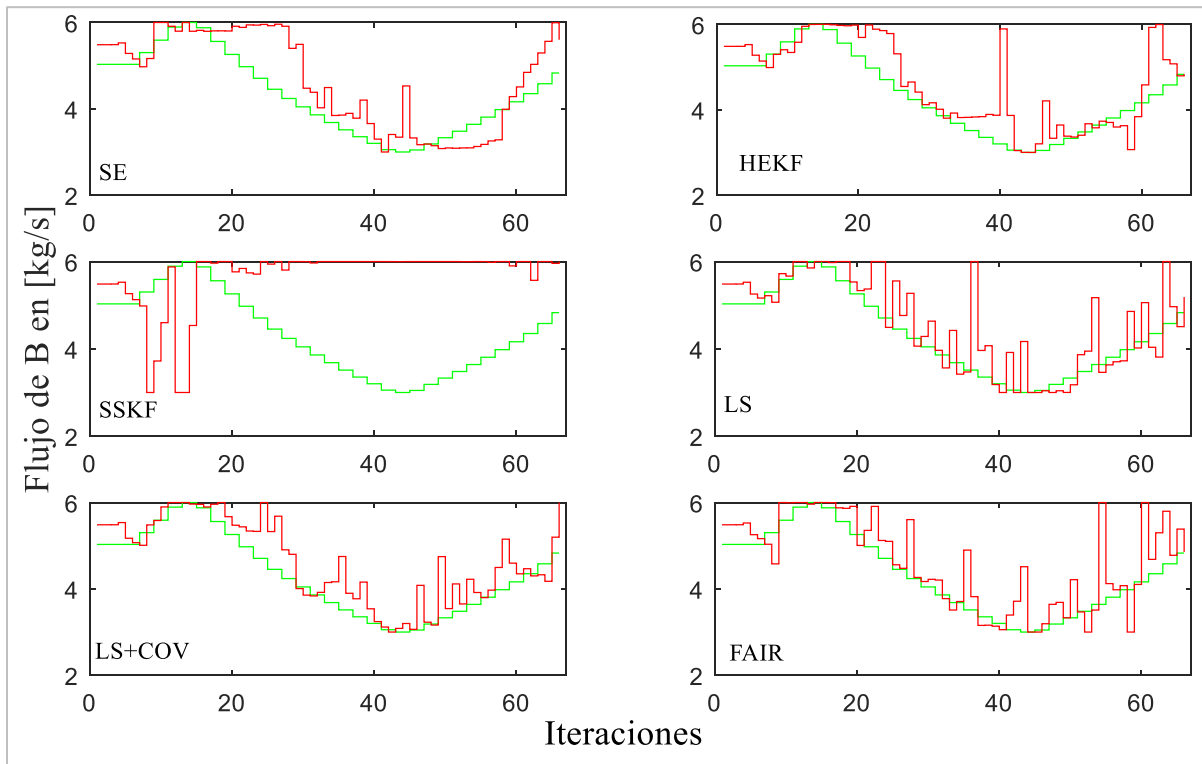


Figura 6.15. Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.

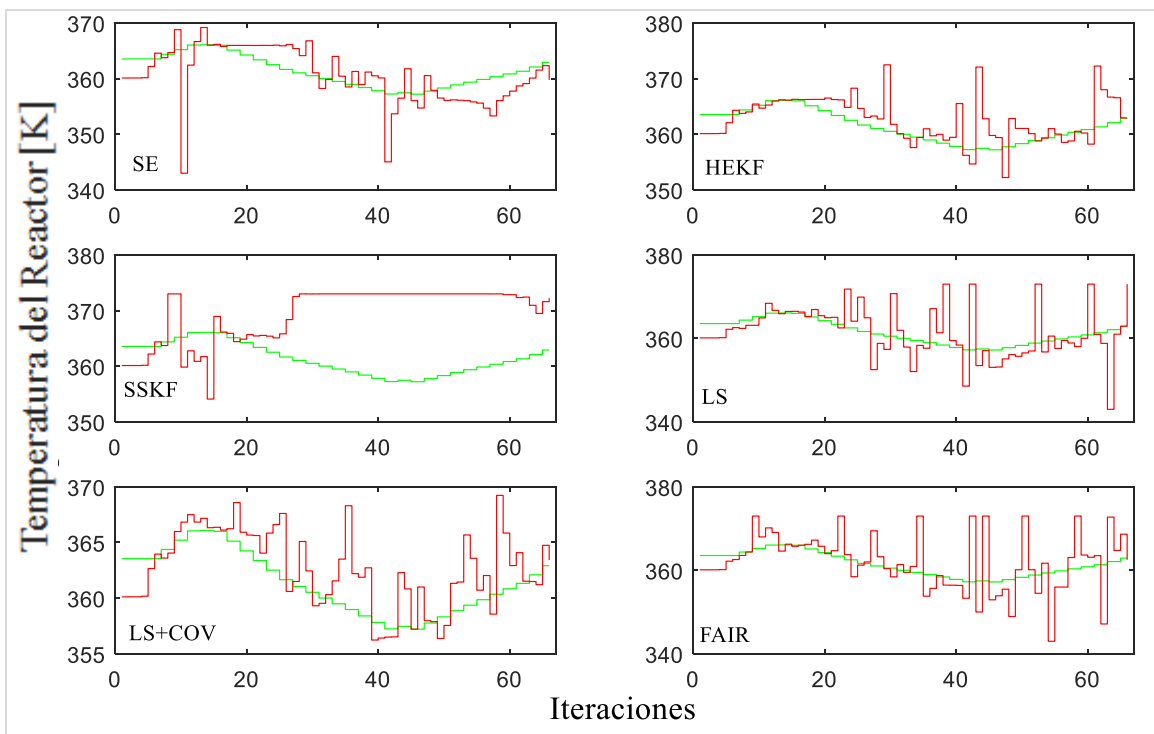


Figura 6.16. Comparación de la variable de decisión 2 (temperatura del Reactor) obtenida al incluir las distintas metodologías de estimación de perturbaciones incluidas cada 2 ciclo de RTO.

Se obtienen mejores resultados que para perturbaciones cada un ciclo de RTO en casi todas las propuestas. Pero no se ve un mejor desempeño evidente dado que todas las metodologías muestran una gran cantidad de sobresaltos o *peaks* lo que podría afectar al valor de la función objetivo, específicamente al beneficio obtenido, como se muestra en la Figura 6.17:

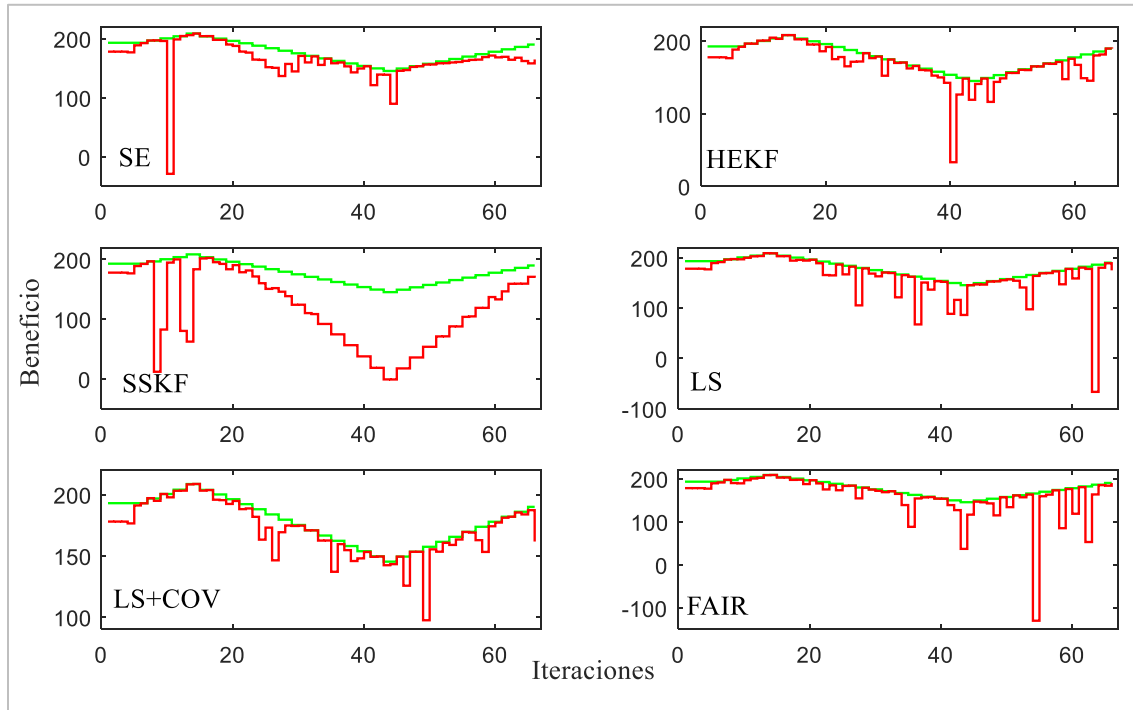


Figura 6.17. Comparación del beneficio obtenido por las diferentes propuestas al aplicar las variables de decisión obtenidas del modelo (rojo) y las variables de decisiones óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclos.

La mejora que se observa en la figura anterior se debería a la misma razón que mejora SE: se tiene más iteraciones con el mismo valor del flujo de A, lo que conlleva que los gradientes sean correctamente calculados además del beneficio que les entrega la estimación de las perturbaciones. Para poder complementar el análisis de los resultados, en la Tabla 6.2 se muestran los errores promedios obtenidos.

Tabla 6.2. Comparación de los errores promedios en la estimación de las perturbaciones y de las variables de decisión para perturbaciones cada 6 ciclos de RTO.

Metodología	$F_A\%$	$F_B\%$	$T_R\%$
Sin Estimador	-	12,40	0,81
HEKF	2,83	10,00	0,67
SSKF	19,60	45,78	2,61
LS	15,30	10,37	1,00
LS+COV	24,01	9,20	0,61
FAIR	15,41	10,16	1,13

En esta tabla se observa nuevamente que el menor error promedio para la estimación de F_A es para HHKF. En cambio, para las variables de decisión esta vez el que tiene menor error promedio es para LS+COV. Si bien esta metodología es la que presenta un mejor indicador, al contrastar estos resultados con las figuras de las variables de decisión, se ve que esta es la que presenta mayor cantidad de sobresaltos. Por lo que, si esta se aplicara en un proceso real, este se volvería inestable. Finalmente, se puede afirmar que con excepción de SSKF, la inclusión del estimador de perturbaciones permite tener un menor error promedio en la obtención de las variables de decisión, donde estas presentan una tendencia parecida al proceso real, pero con una gran cantidad de sobresaltos.

Respecto a las composiciones de A y G, y sus respectivas restricciones, estas se muestran en la Figura 6.18 y Figura 6.19, respectivamente:

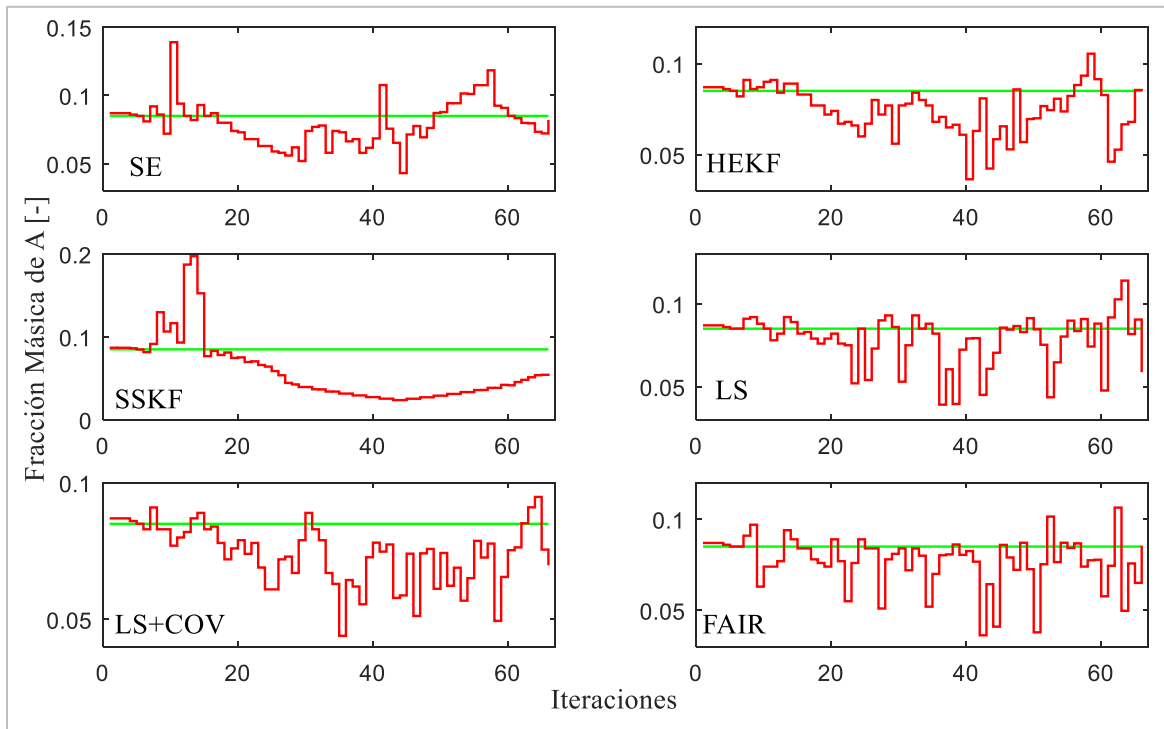


Figura 6.18. Comparación de la evolución de la fracción másica de A (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclo.

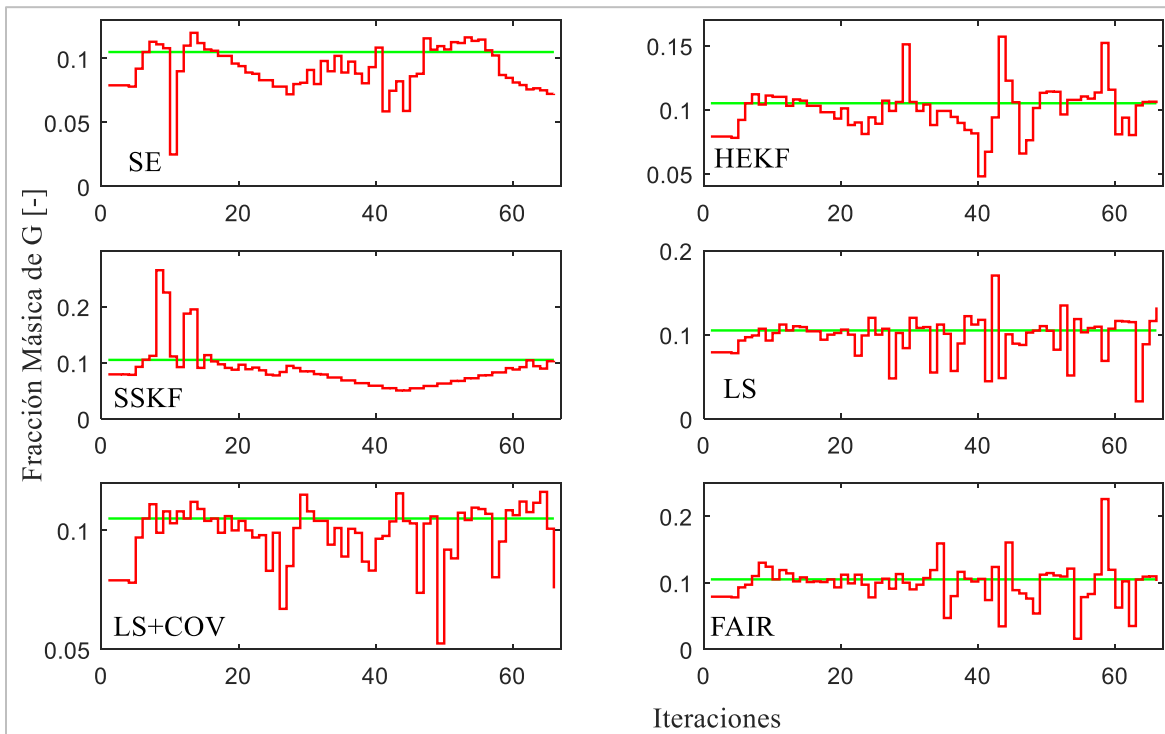


Figura 6.19. Comparación de la evolución de la fracción másica de G (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclo.

En las figuras anteriores se observa que aumenta la cantidad de puntos infactibles a lo largo de las iteraciones. Esto se debería a la presencia de los ya mencionados *peaks*, lo que al tener cambios muy abruptos en su valor aumentarían la cantidad de puntos que sobrepasan las restricciones operacionales.

6.4.3 Cada 3 ciclos de RTO o más

Desde este punto en adelante la RTO con MA Dual logra obtener variables de decisión similares a las del proceso real y con una tendencia mucho más definida. A continuación, se muestran las variables de decisión en la Figura 6.20 obtenidas en la situación con perturbaciones cada 6 ciclos de RTO y su respectivo beneficio obtenido en la Figura 6.21.

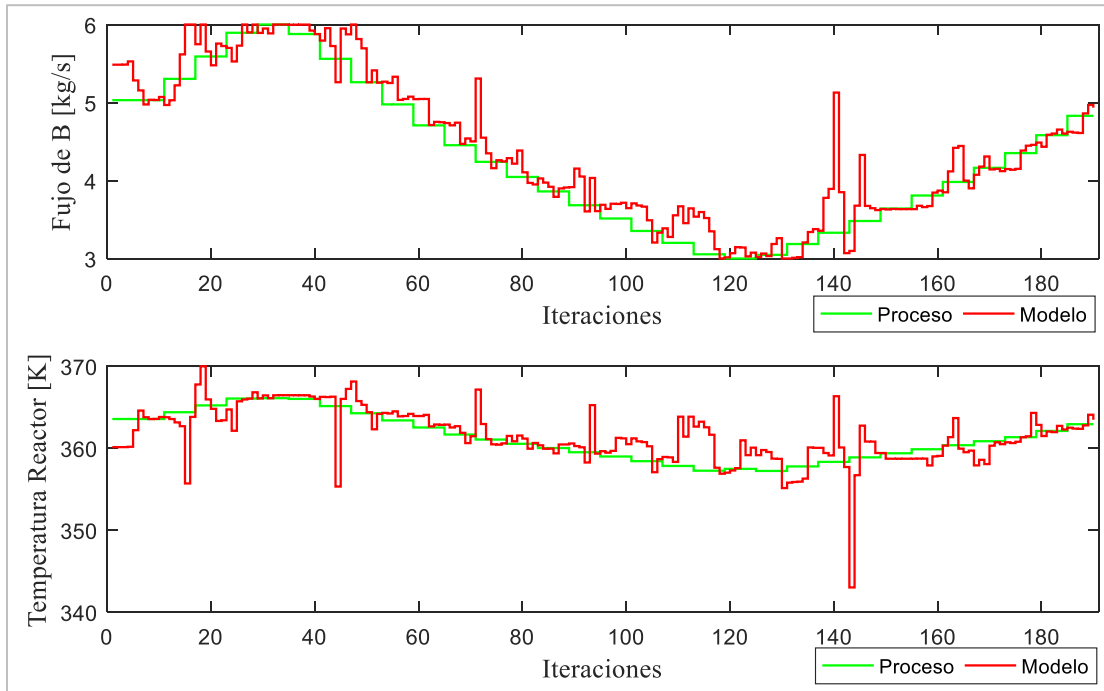


Figura 6.20. Evolución de la variable de decisión (Flujo de B izquierda y temperatura a la derecha) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclos.

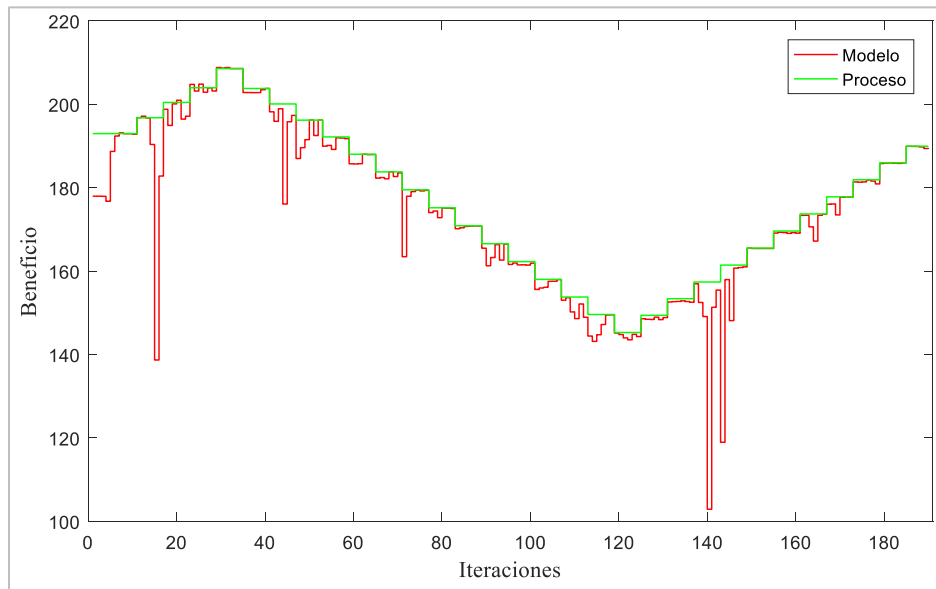


Figura 6.21. Evolución de la función objetivo en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclos

En la Figura 6.20 se observan un mejor comportamiento de las variables de decisión, no quedando en valores estancados a lo largo de las iteraciones como en el caso de cada 1 y 2 ciclos. Este mejor comportamiento también se ve reflejado en la función objetivo y el respectivo beneficio obtenido. Esto se debe principalmente a que al tener una mayor cantidad de iteraciones de RTO con un valor de perturbación constante, se logra una mejor estimación de los gradientes y a su vez de los modificadores, puesto que $\mathcal{D}_k = 0$ en la Ecuación 3.5 para una mayor proporción de las ejecuciones de la RTO, por lo

que disminuye la influencia de perturbaciones en la Ecuación 3.1. Este mismo comportamiento se repite para los casos en que las perturbaciones son realizadas cada 3, 4 y 5 ciclos de RTO.

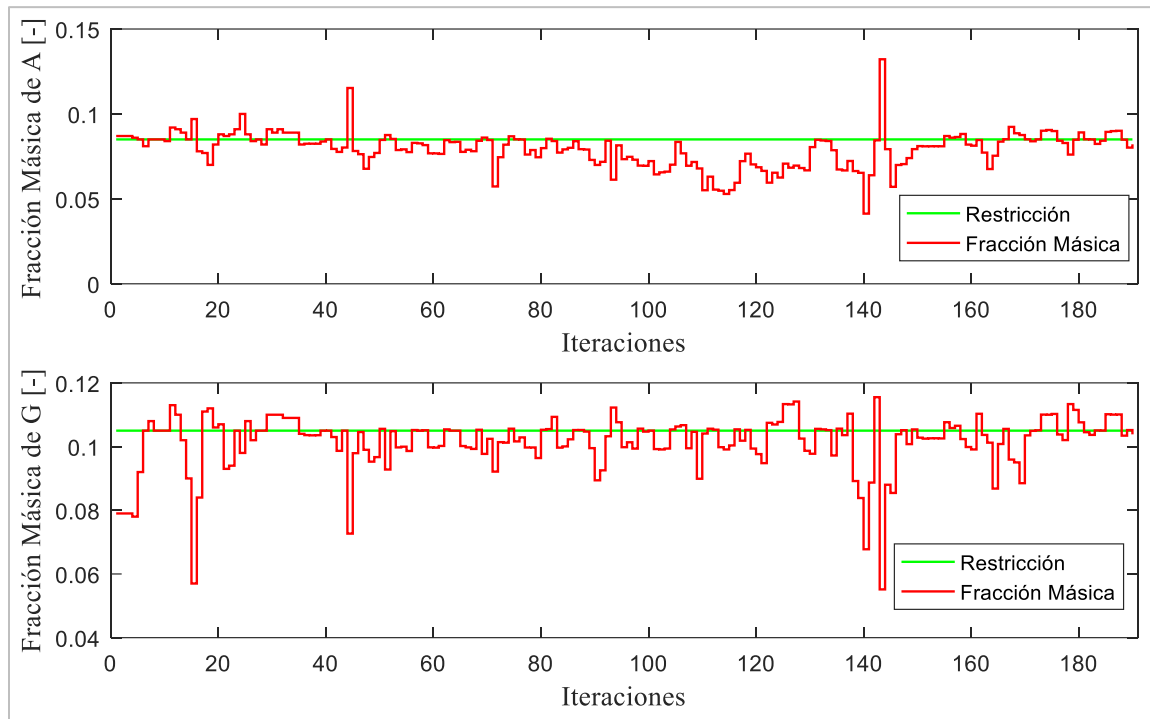


Figura 6.22. Evolución de las fracciones másicas (rojo) y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclo.

Al incluir las propuestas de estimación de perturbaciones se obtienen los siguientes resultados graficados en la Figura 6.23 y Figura 6.24, que corresponden a los resultados de la estimación de F_A y la variable de decisión 1 obtenida de la RTO respectivamente.

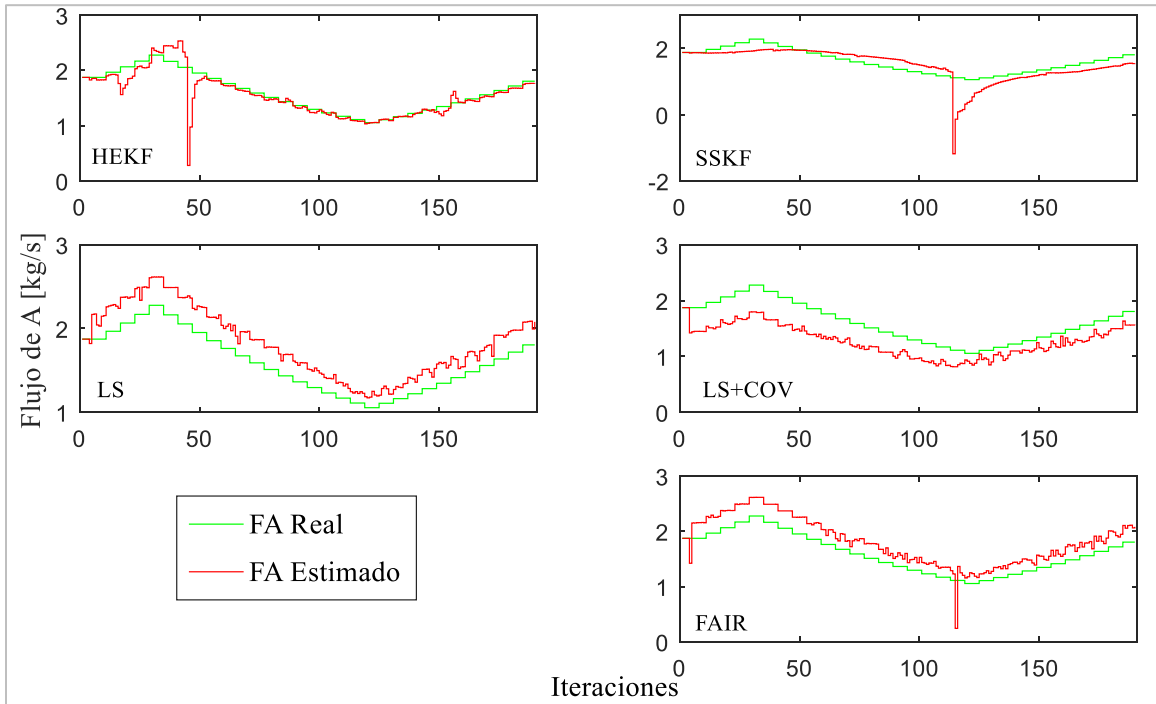


Figura 6.23. Comparación de del valor estimado para F_A obtenida con los distintos estimadores de perturbaciones para perturbaciones cada 6 ciclos.

En esta figura se puede observar que el HEKF sigue estimando los valores del flujo de A más cercanos al real. Por su parte LS y FAIR siguen sobre estimando el flujo de A y LS+COV lo subestima.

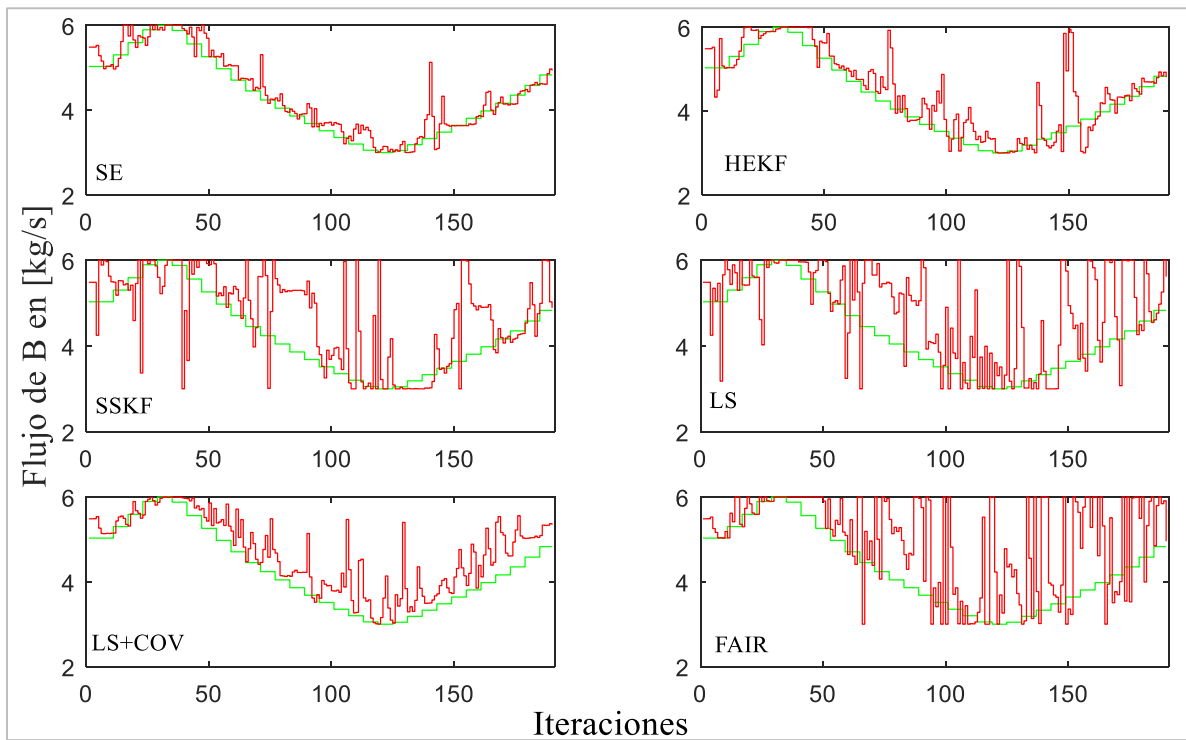


Figura 6.24. Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación para perturbaciones cada 6 ciclos. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.

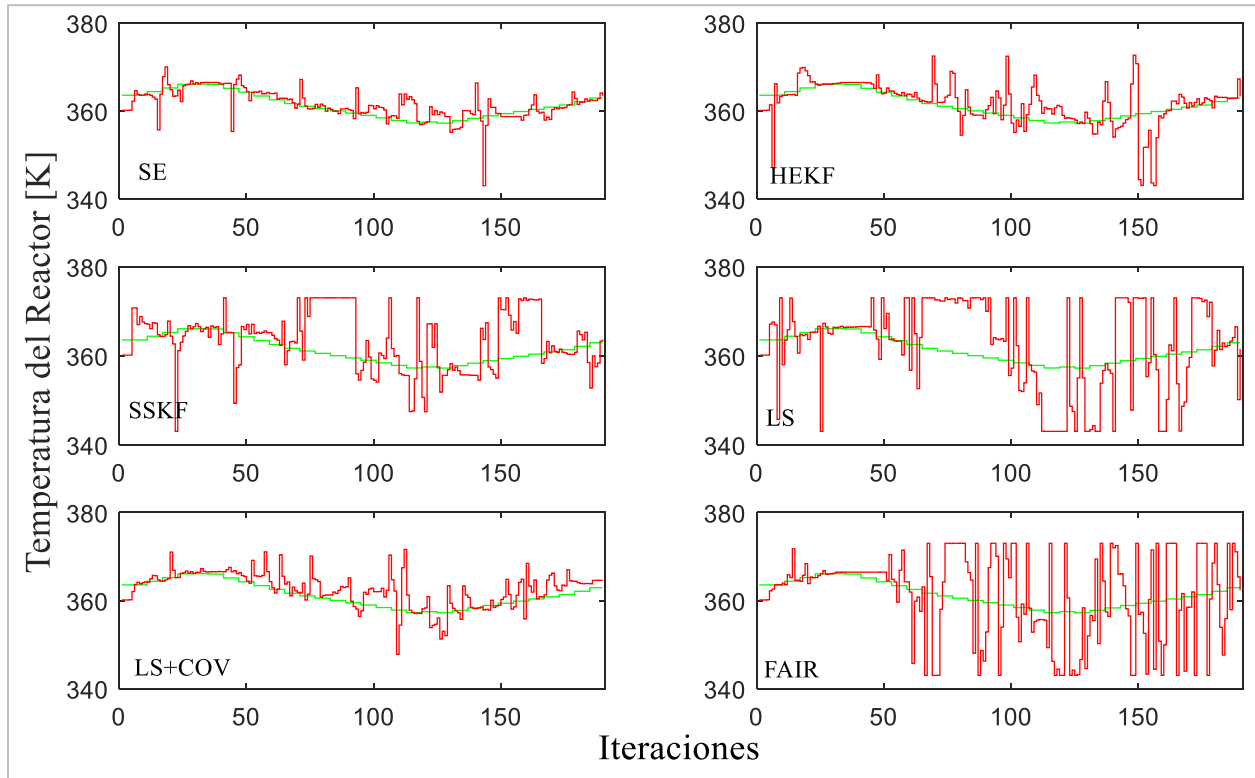


Figura 6.25. Comparación de la variable de decisión 2 (temperatura del Reactor) obtenida al incluir las distintas metodologías de estimación de perturbaciones incluidas cada 6 ciclos de RTO.

En la Figura 6.24 y la Figura 6.25 se observa que en el caso de HEKF y LS+COV mantienen resultados similares al caso SE, no mostrando una mejora evidente. Pero para el caso SSKF, LS y FAIR se aprecia que, en vez de mejorar los resultados, estos empeoran mostrando en una gran diferencia respecto al proceso e inestabilidad para poder estimar las variables de decisión. Esto se debería a problemas ocasionados por los estimadores, ya que durante el periodo de tiempo donde F_A se mantiene constante, los estimadores van entregando valores que no son necesariamente iguales, informando valores distintos al modelo con lo que no se obtiene un valor de $\mathcal{D}_k = 0$ en la Ecuación 3.5, asignándole influencia en el proceso a una variable que no ha cambiado, y por lo tanto la aproximación de los gradientes no es la correcta. Esto se ve reflejado en el beneficio que se muestra a continuación en la Figura 6.26:

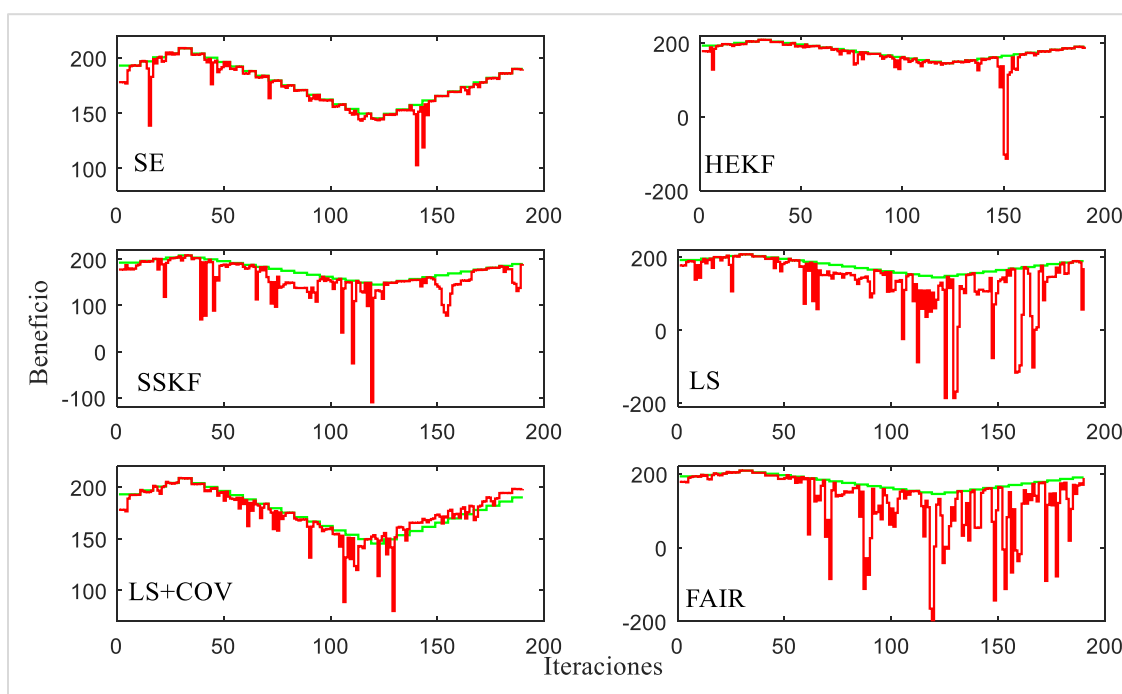


Figura 6.26. Comparación del beneficio obtenido por las diferentes propuestas al aplicar las variables de decisión obtenidas del modelo (rojo) y las variables de decisión óptimas del proceso (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclos.

Se observa en la figura anterior, que al tener una mayor inestabilidad en la obtención de las variables de decisión que optimizan al proceso, el beneficio obtenido presenta el mismo problema, empeorando su resultado en los casos como SSKF, LS y FAIR de forma evidente. Para LS+COV y HEKF se tienen resultados similares a SE, pero no mostrando una mejora evidente. La metodología sin estimador de perturbaciones tendría un mejor resultado ya que al tener una tasa de cambio bastante más lenta en comparación con la ejecución de la RTO, el valor del del flujo de A podría considerarse como un “parámetro” del modelo y como se mencionó en la teoría esta metodología es capaz de sobreponerse a la incertidumbre paramétrica, con lo que no sería necesario que este valor fuese igual al valor real.

Tabla 6.3. Mejores propuestas para la estimación de perturbaciones y obtención de variables de decisión que optimizan el proceso desde 3 hasta 6 ciclos.

Perturbación	Mejor F_A %	Mejor F_B %	T_R %
Cada 3 Ciclos	HEKF	SE	SE
Cada 4 Ciclos	HEKF	SE	SE
Cada 5 Ciclos	HEKF	HEKF	HEKF
Cada 6 Ciclos	HEKF	SE	SE

En la Tabla 6.3 se puede ver que para la estimación del F_A , el HEKF sigue teniendo el mejor desempeño. Pero al analizar el resultado de las variables de decisión, se infiere que no hay una mejora sustancial en

los resultados obtenidos, siendo incluso mejor el desempeño de SE que el resto (Para ver los respectivos porcentajes ir a Tabla 11.1 en el anexo B).

Respecto a las restricciones están se muestran en la Figura 6.27 y Figura 6.28:

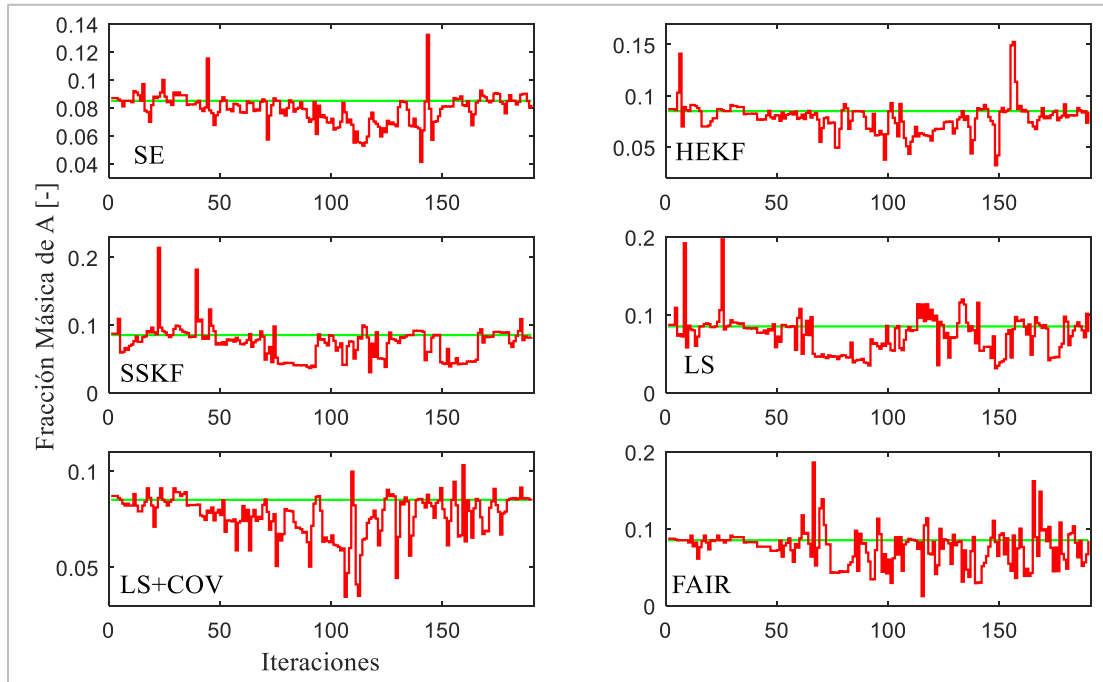


Figura 6.27. Comparación de la evolución de la fracción máscas de A (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclo.

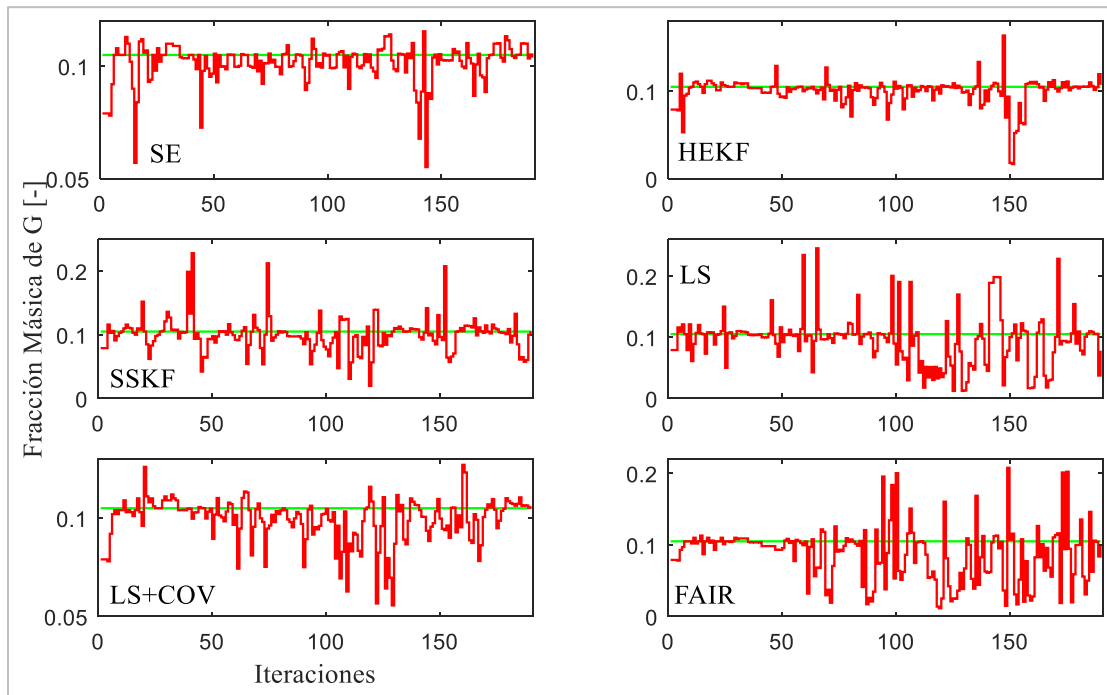


Figura 6.28. Comparación de la evolución de la fracción máscas de G (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclo.

En ambas figuras se observa que solo HEKF tendría un desempeño similar a SE en el cumplimiento de las restricciones. Esto se debería a su mejor estimación de la perturbación y su repercusión en la obtención de las variables de decisión.

Por todo lo anterior y el análisis realizado, se puede afirmar que la inclusión de estimadores de perturbación ayuda a la metodología MA Dual cuando las perturbaciones tienen una frecuencia de cambio similar a la RTO, ya que es posible incluir todas las variables que afectan al gradiente del proceso en su estimación. Cuando estas son considerablemente distintas, la metodología Dual sin estimadores logra sobrellevar el efecto las perturbaciones en el sistema, puesto que cuenta con mayor información donde la perturbación se mantuvo constante y no incluye información errónea en la estimación del gradiente del proceso.

6.5 Simulación con perturbaciones tipo ARIMA

Como ya se mencionó se utilizó una función ARIMA (1,0,2) que permite modelar una perturbación que presente cierto grado de correlación de los datos, comportamiento cíclico o periodicidad y que tenga una parte estocástica. Con esta función se generaron 4 posibles realizaciones de perturbaciones que pueden describir el flujo de A que se presentan en la Figura 6.29, con los mismos límites de la perturbación tipo escalón.

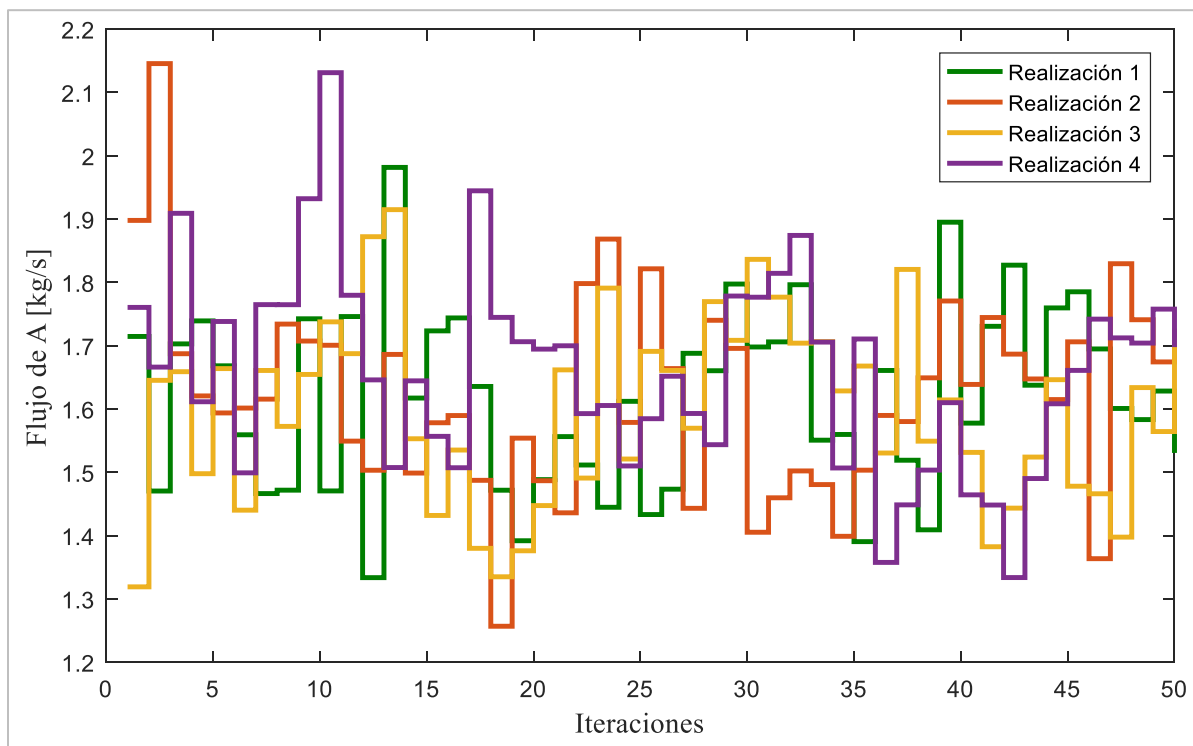


Figura 6.29. Cuatro posibles caminos generados con la función ARIMA (1,0,2). Cada color representa un camino distinto para la misma perturbación.

Las realizaciones serán nombradas desde C1 a C4 respectivamente.

6.5.1 Cada 1 ciclo de RTO

En este caso las perturbaciones no tienen una tendencia definida ni una tasa de cambio en particular, por lo que la estimación de los gradientes del proceso debería presentar cierta dificultad y fuente de errores para la RTO. A continuación, se muestra la Figura 6.30 con el comportamiento de la RTO con MA Dual en la obtención de la variable de decisión 1 para todas las realizaciones, las cuales serán descritas como C1 a C4 respectivamente.

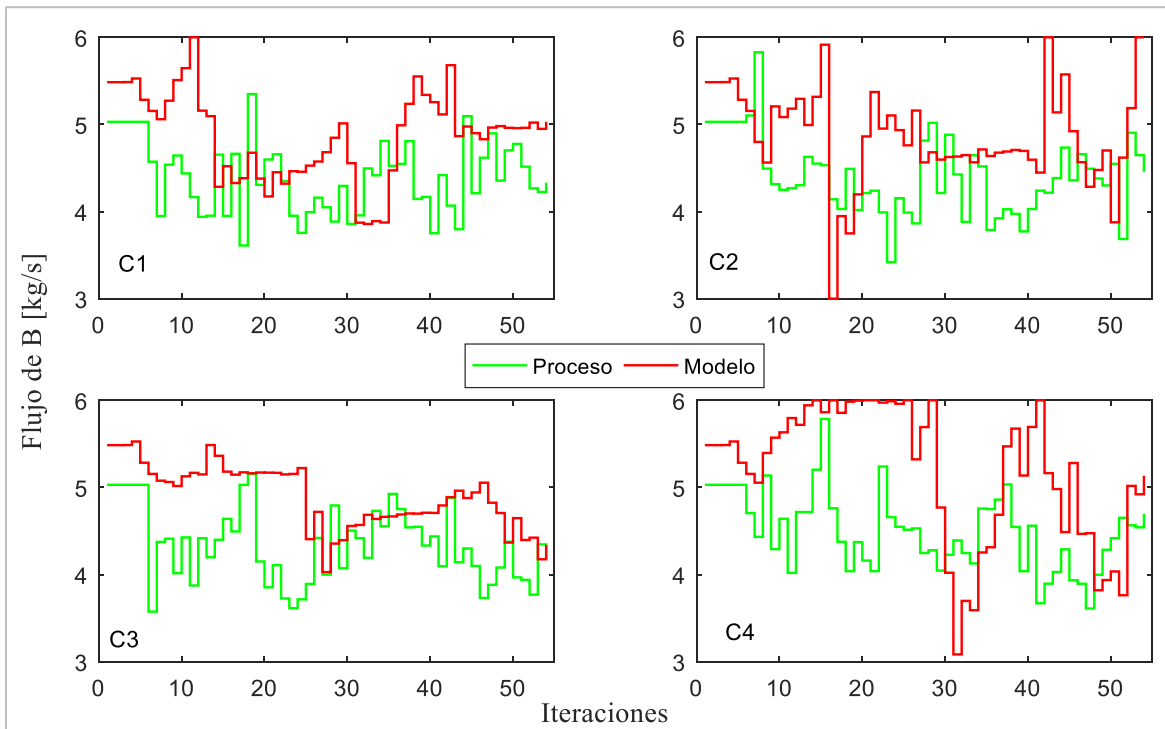


Figura 6.30. Evolución de la variable de decisión 1 (flujo de B) en las distintas realizaciones generadas con la función ARIMA, con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO.

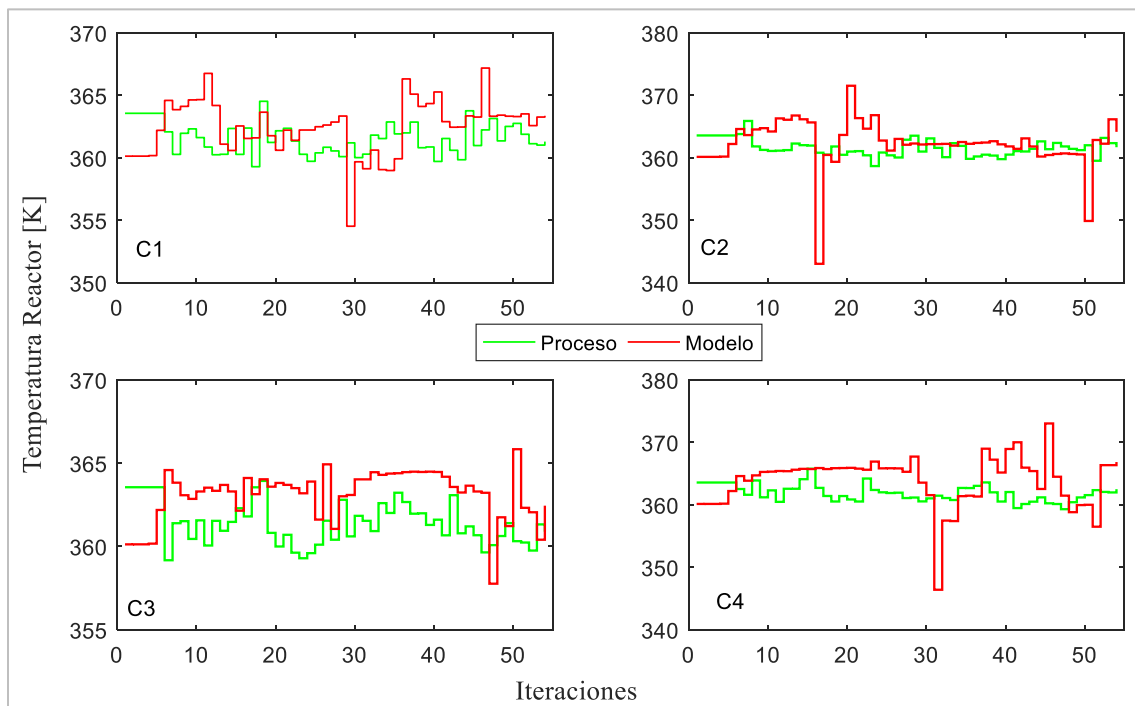


Figura 6.31. Evolución de la variable de decisión 2 (Temperatura) en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO.

Al revisar los resultados detallados en Figura 6.30 y la Figura 6.33, se puede observar que la RTO no logra seguir la misma evolución en las variables de decisión que optimizan al proceso. Esto se debería a que en algunos casos los cambios en el flujo de A son muy altos, por lo que utilizar diferencias finitas para calcular el gradiente del proceso y del modelo resulta en la incorrecta estimación al influir la perturbación en las variables dependientes. Es de esperar que con la inclusión de los estimadores de perturbación la RTO logre seguir más de cerca las variables de decisión que optimizan al proceso ya que permiten incluir mayor información en el cálculo del gradiente, como también con el aumento de ciclos de RTO entre las perturbaciones, similar a lo que se obtuvo con las perturbaciones tipo escalón. Lo antes descrito se ve reflejado en el beneficio obtenido como se muestra en Figura 6.32:

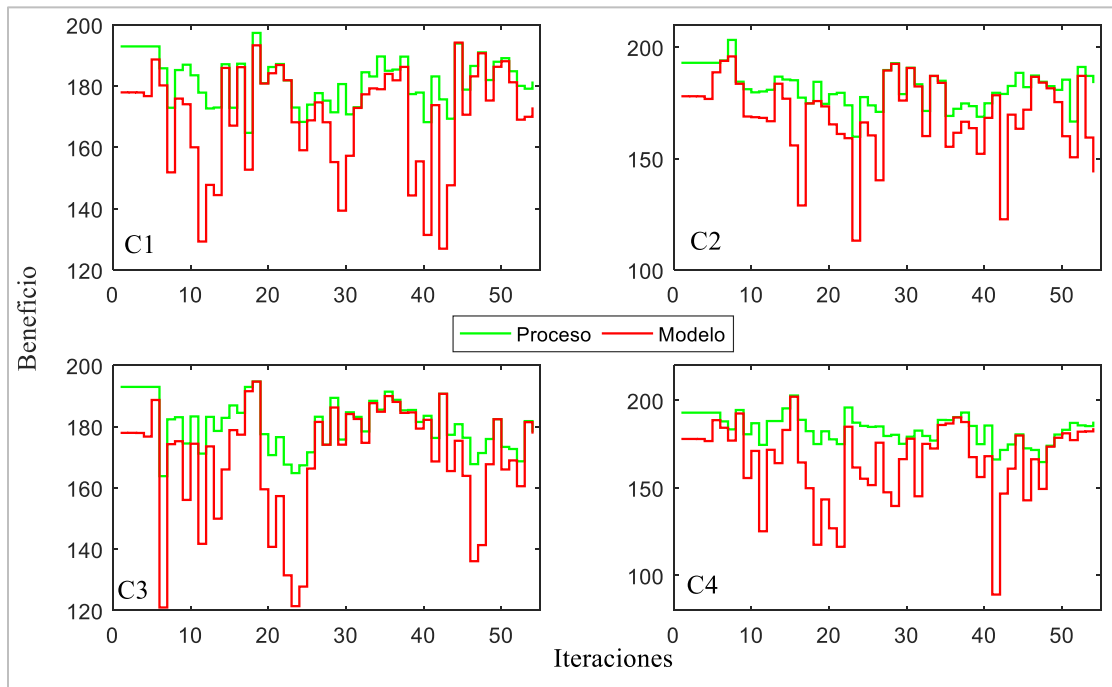


Figura 6.32. Evolución del beneficio en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO.

En esta figura se observa que solo durante algunas iteraciones SE logra seguir el beneficio optimo del proceso lo cual se debería a la mala estimación de los gradientes debido a la mala aproximación de las diferencias finitas utilizadas.

Respecto a las restricciones en la fracción másica de A y G, se tiene la Figura 6.33, que muestra el comportamiento de estos componentes y su respectiva restricción para la realización 1.

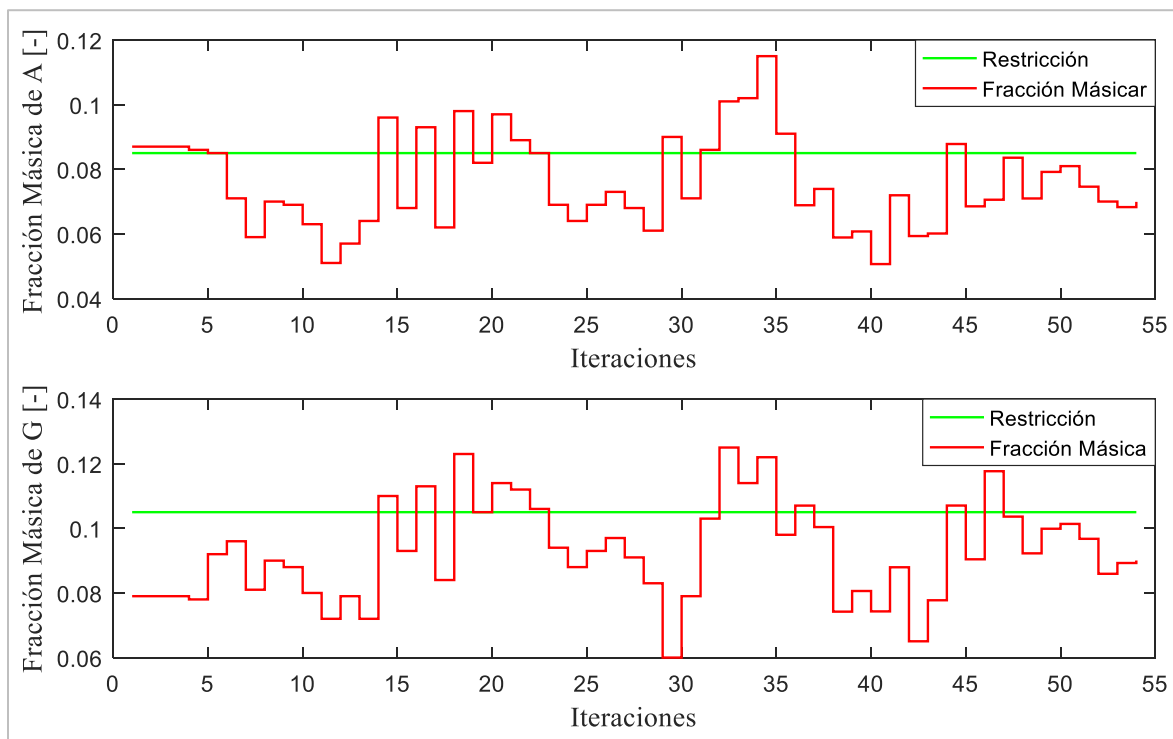


Figura 6.33. Evolución de las fracciones másicas (rojo) y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo para la realización 1.

Se observa que en varias ocasiones se obtienen fracciones molares superiores al límite establecido por las restricciones operaciones. Esto se debería a que como las perturbaciones tienen algunas tasas de cambio muy alta, utilizar diferencias o derivadas direccionales para calcular los gradientes tienen un gran error asociado ya que mientras más alta sea la tasa de cambio, peor es la aproximación del gradiente y a su vez las variables de decisión que optimizan el proceso obtenidas no se asemejan a las del proceso real. Lo anterior tiene sentido porque en las iteraciones donde se tienen un mayor cambio en el flujo de A, corresponde a los instantes donde se supera la restricción.

Realización 1

Para la realización 1 se obtienen la Figura 6.34, Figura 6.35, Figura 6.36 y Figura 6.37 que corresponden a los resultados al incluir los estimadores: estimación del flujo de A, variables de decisión 1, variable de decisión 2 y beneficio obtenido respectivamente.

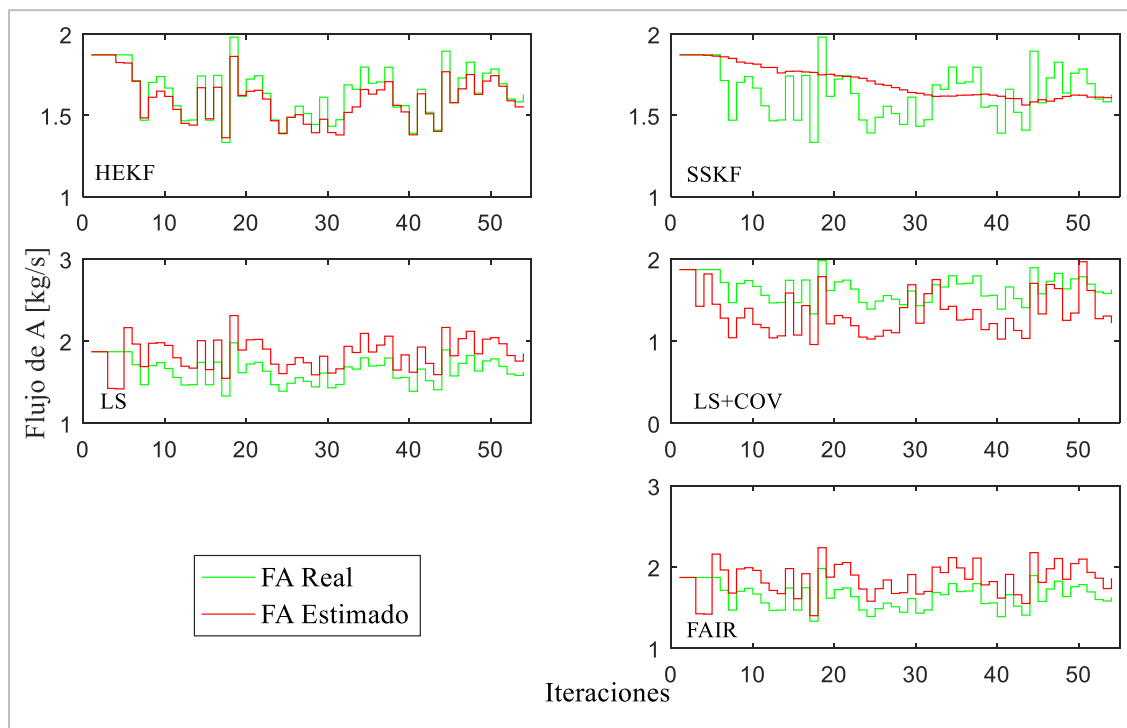


Figura 6.34. Comparación de del valor estimado para F_A obtenida con los distintos estimadores de perturbaciones con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO para la realización 1.

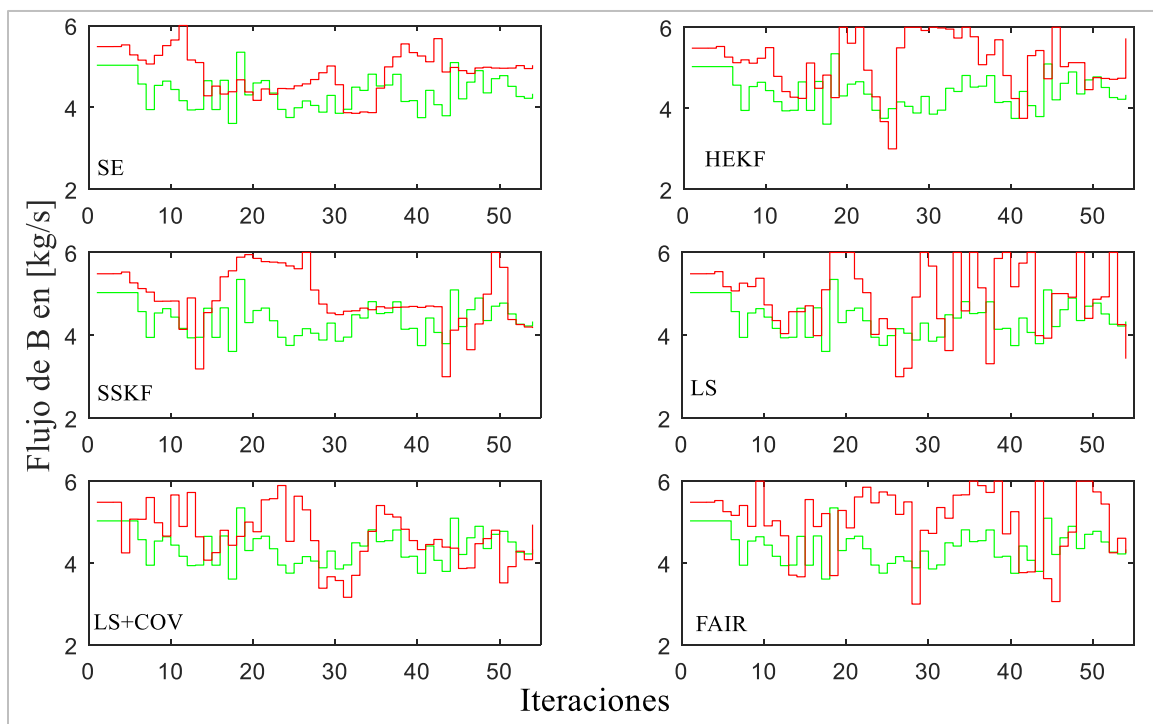


Figura 6.35. Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.

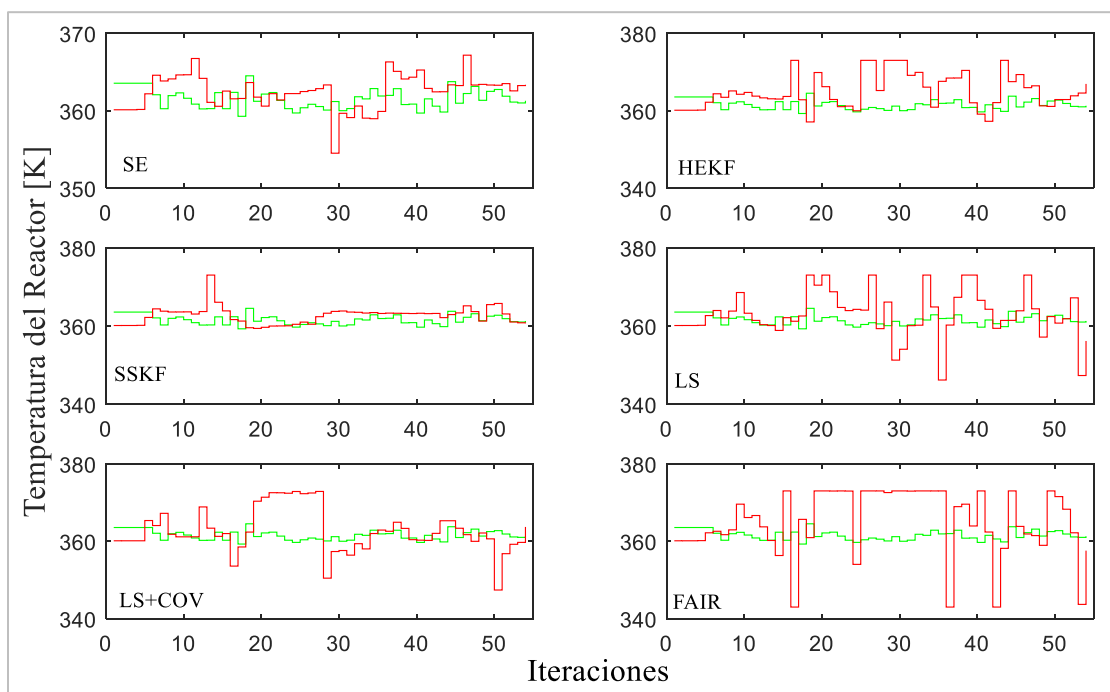


Figura 6.36. Comparación de la variable de decisión 2 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.

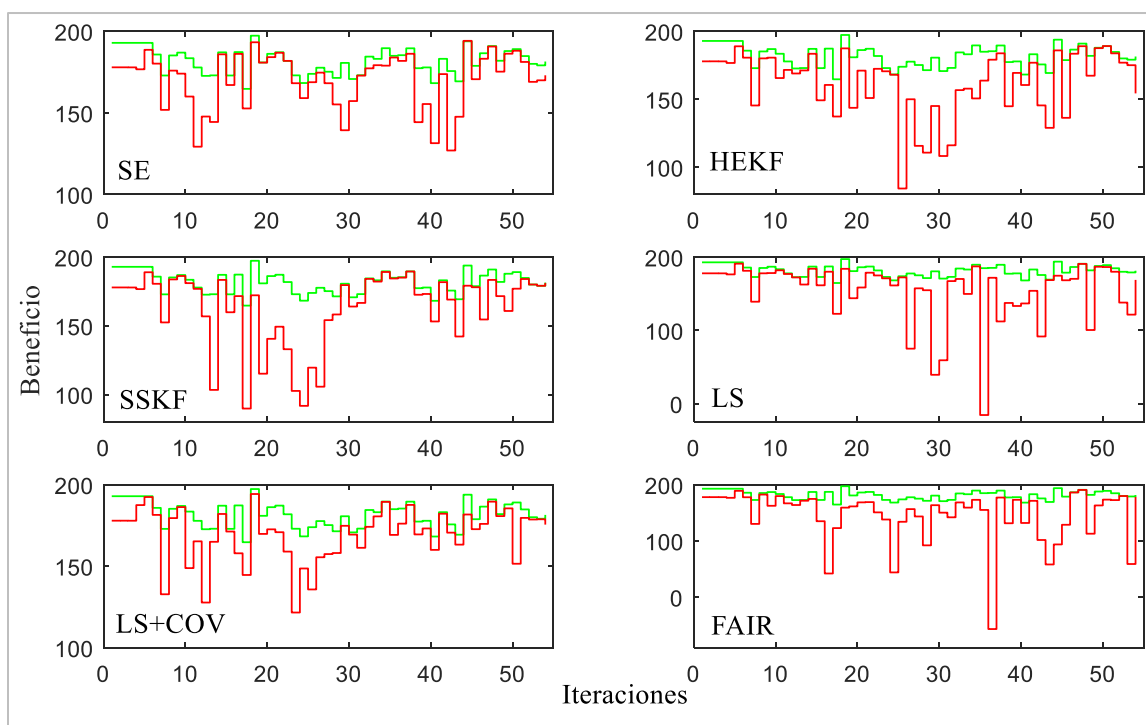


Figura 6.37. Comparación del beneficio obtenido con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación con perturbaciones cada 1 ciclo de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.

En la Figura 6.34 se observan resultados similares a la perturbación escalón, donde el que logra estimar de mejor forma es el HEKF, LS y FAIR sobreestiman el valor de F_A y LS+COV lo subestima. En el caso de SSKF solo logra tener una tendencia parecida lo que se sería una media móvil de la perturbación.

Respecto a las Figura 6.35 y Figura 6.36 no se logra observar una mejoría evidente con la inclusión de alguno de los estimadores de perturbación para ninguno de las dos variables de decisión lo que también se ve reflejando en el beneficio mostrado en la Figura 6.37 donde no se observa una mejora evidente en ninguno de los estimadores utilizado, por lo que será necesario revisar el error promedio del flujo de A y las variables de decisión para saber si se obtiene alguna mejora.

En la Tabla 6.4 se presentan los errores promedios.

Tabla 6.4. Comparación de los errores promedios en la estimación de las perturbaciones y de las variables de decisión para el camino 1

Metodología	F_A %	F_B %	T_R %
SE	-	15,20	0,64
HEKF	2,85	20,78	1,28
SSKF	8,44	16,26	0,62
LS	14,48	19,26	1,26
LS+ COV	19,37	14,62	1,19
FAIR	14,61	22,13	2,13

Según la tabla anterior la mejor estimación del flujo de A es HEKF. En el caso de las variables de decisión solo con un estimador se logra tener un error promedio menor, LS+COV en el caso del flujo de B y SSKF en el caso de la temperatura, pero con valores muy cercanos al caso SE.

Los resultados que se muestran en la Figura 6.36 y Tabla 6.4 se deberían a que como las diferencias utilizadas para el cálculo de los gradientes en las Ecuación 3.1 son muy grandes, la aproximación de los gradientes no es buena, considerando también que es necesario utilizar una mayor cantidad de información pasada (4 puntos de RTO anterior) que se encontraba con otro valor del flujo de A, sumando otra fuente de error en el cálculo de los gradientes.

Es por lo anterior que se puede afirmar que con una tasa de cambio similar a la de un ciclo de RTO la inclusión de estimadores de perturbación no logra mejorar la obtención de las variables de decisión.

Respecto a las restricciones, se tienen la Figura 6.38 y la Figura 6.39, que muestran la comparación en las restricciones al incluir los estimadores de perturbación:

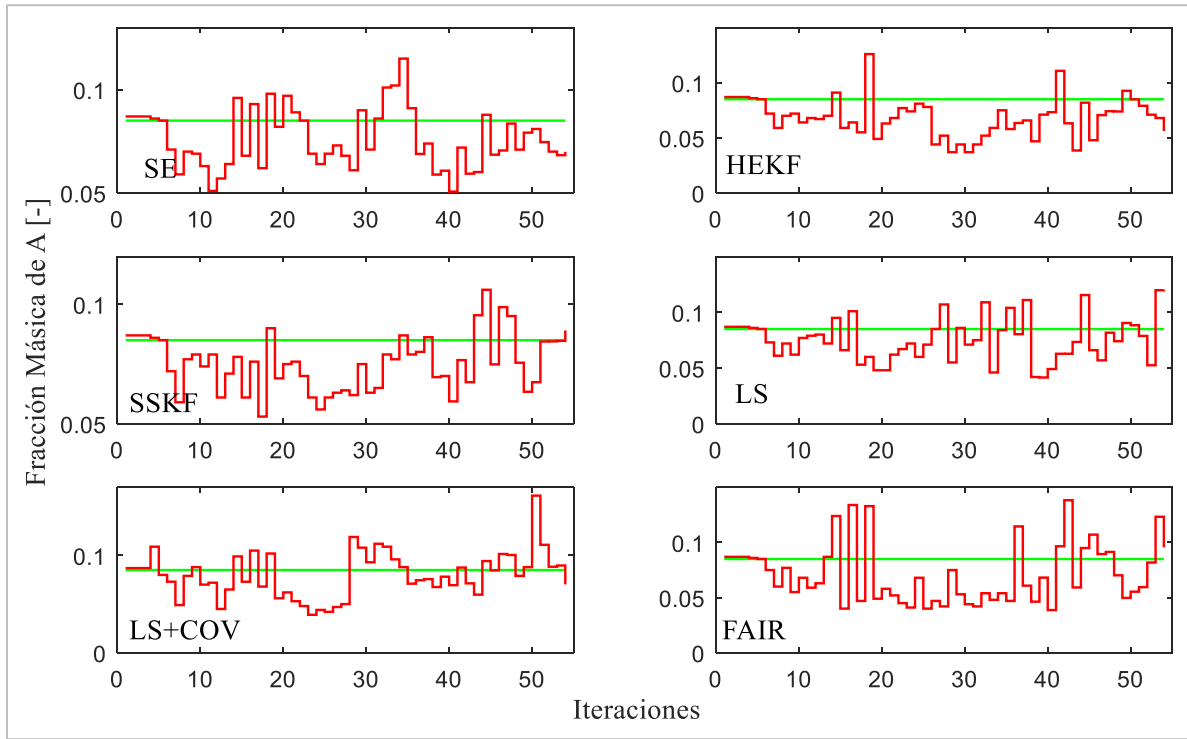


Figura 6.38. Comparación de la evolución de la fracción másica de A (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo para la realización 1.

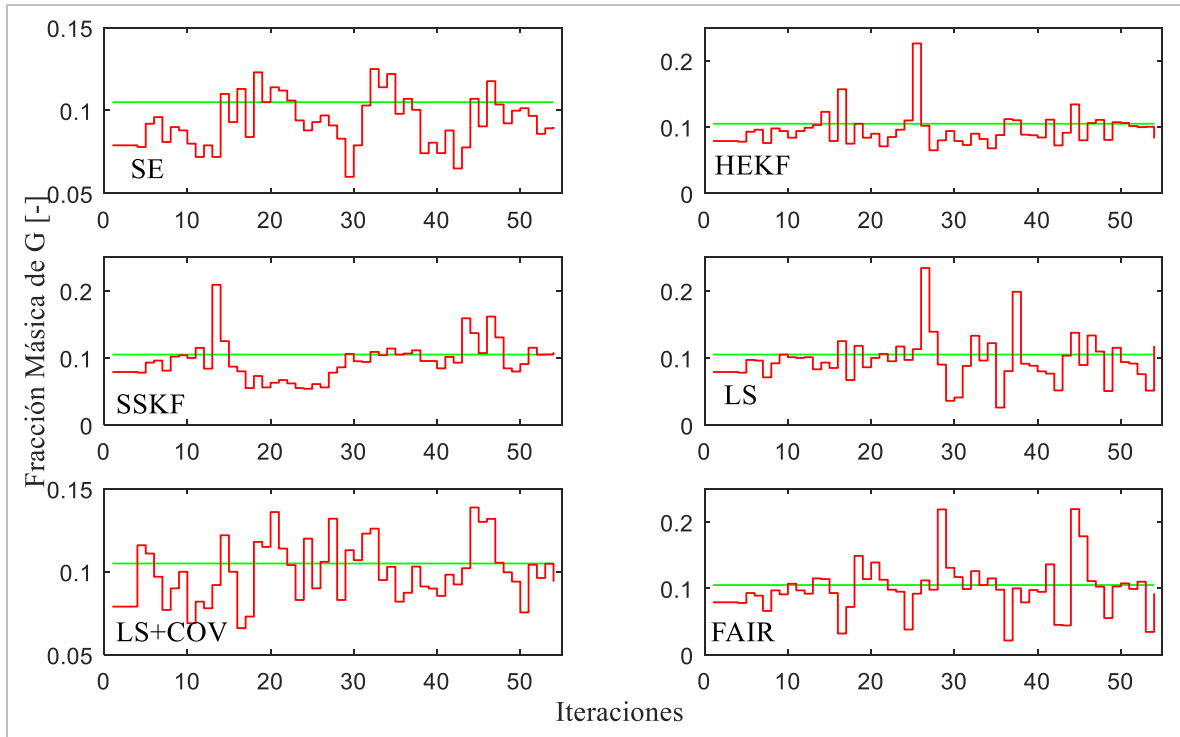


Figura 6.39. Comparación de la evolución de la fracción másica de G (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 1 ciclo para la realización 1.

Se observa que la inclusión de los estimadores de perturbación no mejora el desempeño de la RTO respecto al cumplimiento de las restricciones respecto a las fracciones molares de A y G. Esto se debería a que se le añade más error al cálculo del gradiente al utilizar 4 mediciones pasadas que tiene un valor distinto para el flujo de A, lo que a su vez no permite llegar a valores similares al óptimo de las variables de decisión del proceso del proceso

Realización 2, 3 y 4

El caso de estas realizaciones de la perturbación estocástica es muy similar al anterior, puesto que la inclusión de estimadores de perturbación no logra mostrar una mejoría evidente en la obtención de las variables de decisión. Solo durante un periodo corto de iteraciones se logra tener un comportamiento similar con alguno de los estimadores. Durante algunos pasajes de las iteraciones HEKF, LS+COV y FAIR logran tener un comportamiento similar al del proceso justo donde la perturbación muestra una cierta tendencia o con una tasa de cambio menor. Esto hace entender que el desempeño de las distintas propuestas para mejorar SE será proporcional al comportamiento de la perturbación, además esto podría indicar que es necesario agregar una región de confianza al resultado obtenido de las variables de decisión que optimizan el modelo. Para esto sería necesario definir un rango de variación respecto al valor en el tiempo $k - 1$ y así evitar variaciones muy grades que afecten a las RTO futuras. También se podría utilizar un filtro en los gradientes para suavizar el cambio que tiene este. Para las restricciones se obtienen resultados similares.

Finalmente, se muestra dos tablas resúmenes de los errores porcentuales: La primera (Tabla 6.5), corresponde a la estimación de la perturbación en los distintos caminos, y la segunda (Tabla 6.6.) a la obtención de las variables de decisión.

Tabla 6.5. Resumen de los errores porcentuales obtenidos en la estimación del flujo de A en los caminos 2, 3 y 4 generados con la función ARIMA, con una perturbación cada 1 ciclo de RTO.

Metodología	C2 [%]	C3 [%]	C4 [%]
HEKF	5,47	3,15	3,15
SSKF	9,68	9,12	9,79
LS	14,96	15,13	20,39
LS+ COV	21,93	23,41	20,52
FAIR	15,14	19,07	20,99

Tabla 6.6 . Resumen de los errores porcentuales obtenidos en la obtención de las variables de decisión en los caminos 2, 3 y 4 generados con la función ARIMA, con una perturbación cada 1 ciclo de RTO.

	C2		C3		C4	
Metodología	$F_B\%$	$T_R\%$	$F_B\%$	$T_R\%$	$F_B\%$	$T_R\%$
SE	15,46	0,82	14,49	0,66	20,72	1,09
HEKF	26,88	1,83	22,99	1,48	23,68	1,43
SSKF	33,51	2,43	24,52	1,02	18,35	1,01
LS	21,69	1,69	22,00	1,92	20,18	1,88
LS+ COV	16,15	1,37	15,68	1,16	12,15	0,82
FAIR	25,12	2,26	15,41	1,37	21,11	1,81

Como se observa de las 2 tablas anteriores, en todos los caminos el mejor estimador de perturbaciones es HEKF, lo cual no se ve reflejado en la obtención de las variables de decisión, presentando en 2 de los 3 caminos un mejor desempeño SE por sobre los demás. Esto confirma que la inclusión de los estimadores de perturbación no logra mejorar la RTO con MA Dual y que sus resultados serán dependientes de la tasa de cambio que presenten las perturbaciones.

6.5.2 Cada 2 ciclos de RTO

En este caso, aun cuando tiene una mayor cantidad de iteraciones con el mismo valor de flujo de A, el sistema Dual no logra seguir la trayectoria en las variables de decisión. A continuación, se presenta la Figura 6.40 y Figura 6.41, que muestra la el seguimiento de la trayectoria para la variable de decisión 1 y 2 en cada realización, respectivamente:

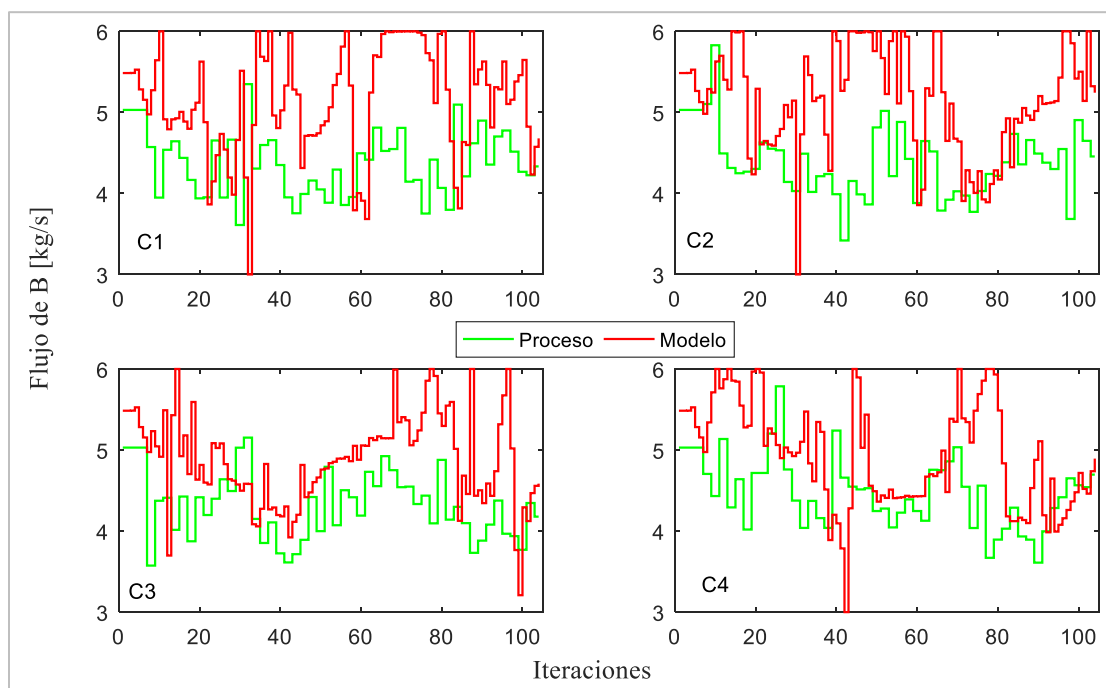


Figura 6.40. Evolución de la variable de decisión 1 (flujo de B) en las distintas realizaciones generadas con la función ARIMA, con perturbaciones cada 2 ciclos de RTO.

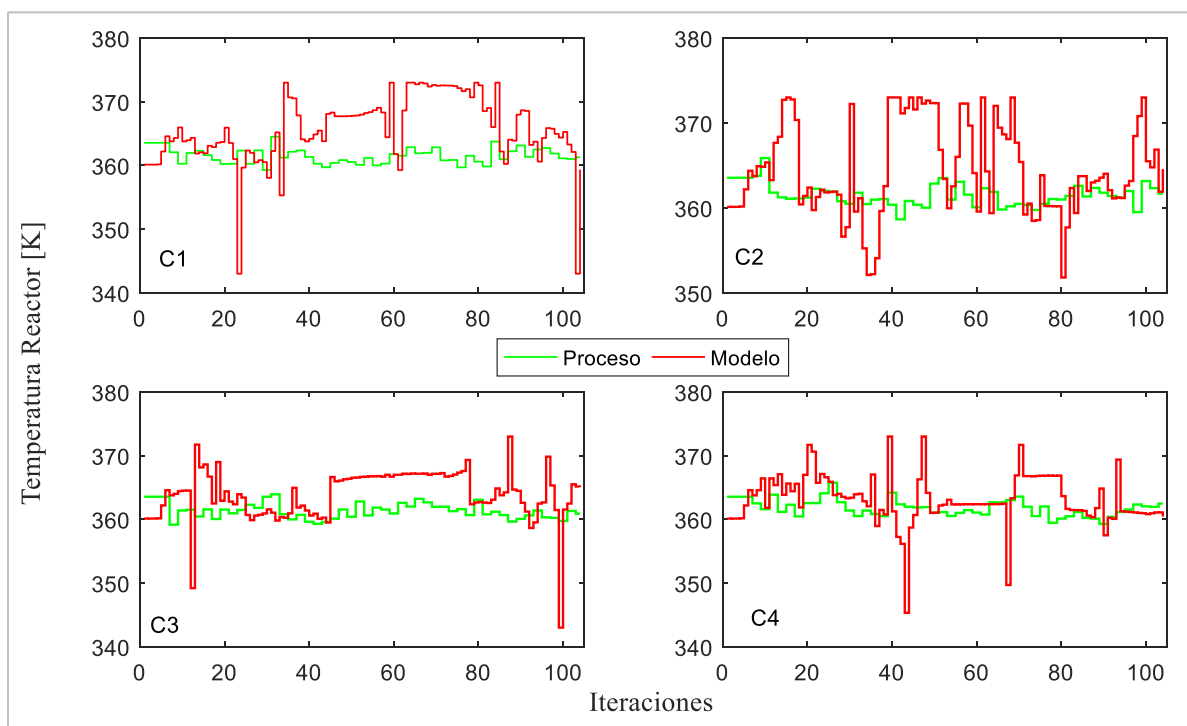


Figura 6.41. Evolución de la variable de decisión 2 (Temperatura) en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 2 ciclos de RTO.

Para el beneficio obtenido se muestra la Figura 6.42, donde se puede comparar los resultados de las realizaciones:

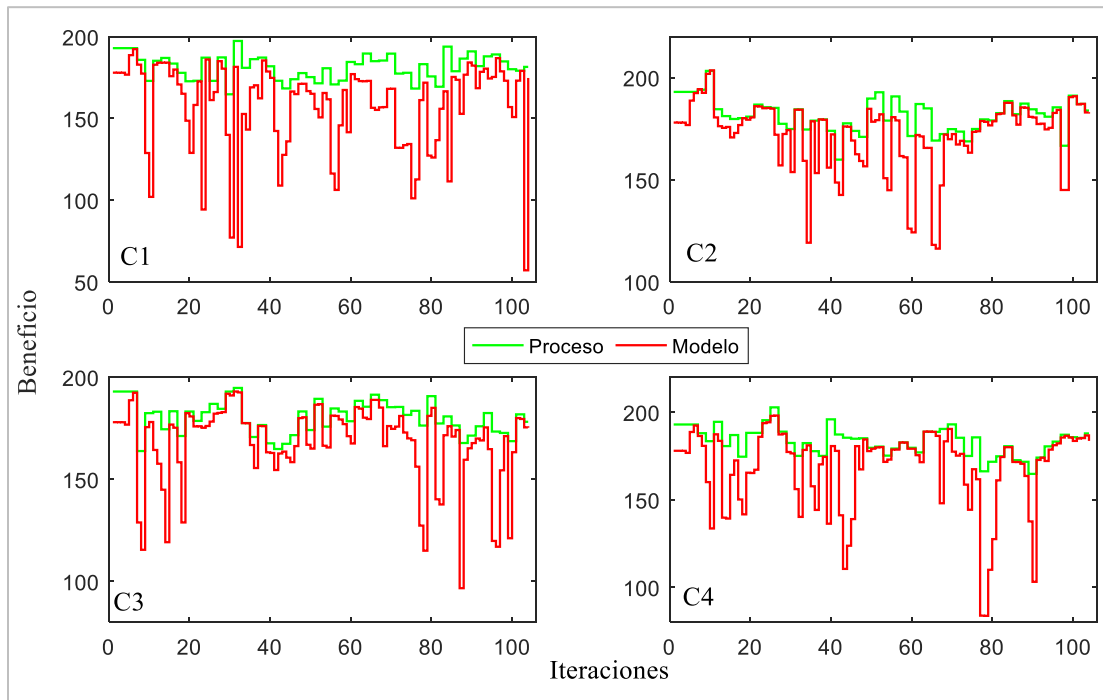


Figura 6.42. Evolución del beneficio en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 2 ciclo de RTO.

En esta figura se aprecia que los resultados mejoran donde se obtienen perturbaciones con una tasa de cambio más pequeña y con una cierta tendencia. Como ejemplo se tiene entre las iteraciones 55 y 90 aproximadamente en C2 y desde la iteración 20 hasta la 70 aproximadamente en C3. En estas zonas se aprecia un comportamiento similar al obtenido en la perturbación escalón, con lo que mejora el resultado. Una vez que se tienen cambios más pronunciados la estimación empeora.

Para analizar las restricciones de C1, se tiene la Figura 6.43 que se muestra a continuación:

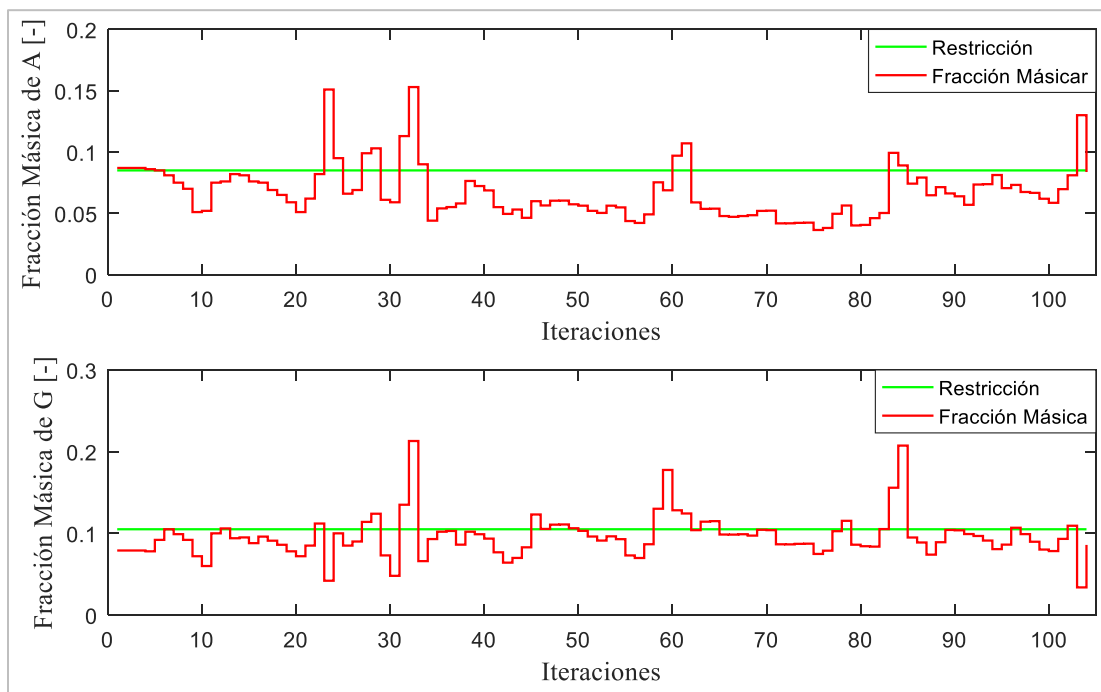


Figura 6.43. Evolución de las fracciones másicas (rojo) y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclos para la realización 1.

En esta figura se observa que la cantidad de iteraciones en que se infringen las restricciones disminuye, respecto a la cantidad de iteraciones totales. Esto se debería a que la metodología Dual cuenta con más iteraciones a un mismo flujo de A, con lo que mejoraría la estimación de los gradientes y a su vez los valores de las variables de decisión que optimizan el proceso.

En la estimación del flujo de A, se observa que el mejor estimador sigue siendo HEKF, como se muestra en la Figura 6.44, pero en la Figura 6.45 y Figura 6.46 es posible observar una mejora en las variables de decisión para este caso. En la Figura 6.47 se observa el comportamiento obtenido en el beneficio:

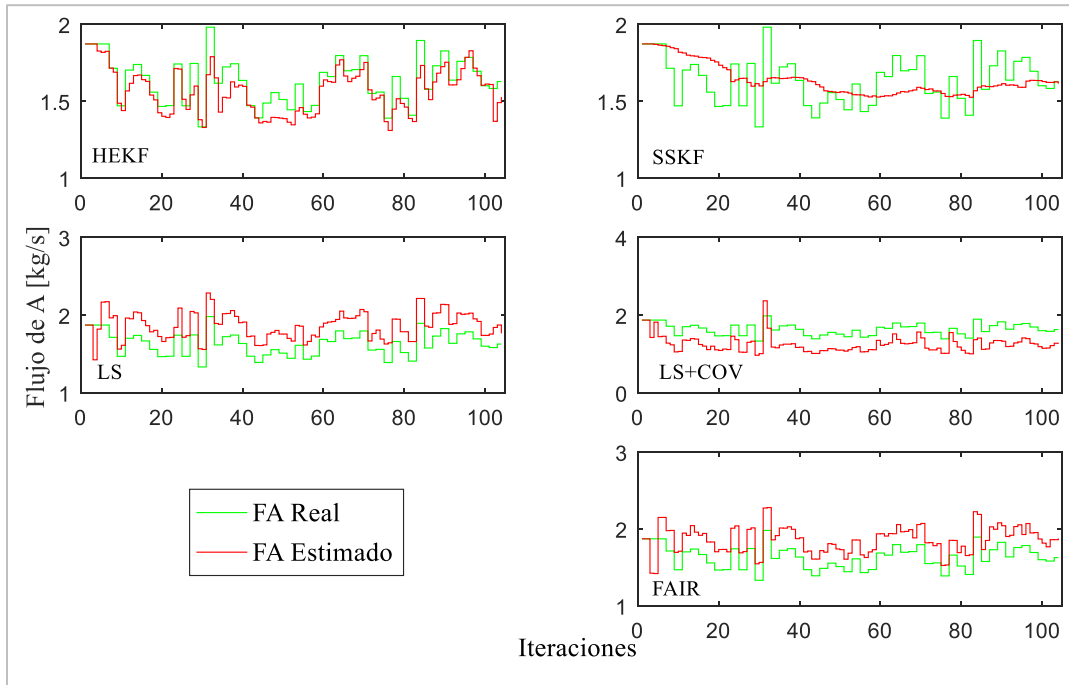


Figura 6.44. Comparación de del valor estimado para F_A obtenida con los distintos estimadores de perturbaciones con perturbaciones cada 2 ciclo de RTO para la realización 1.

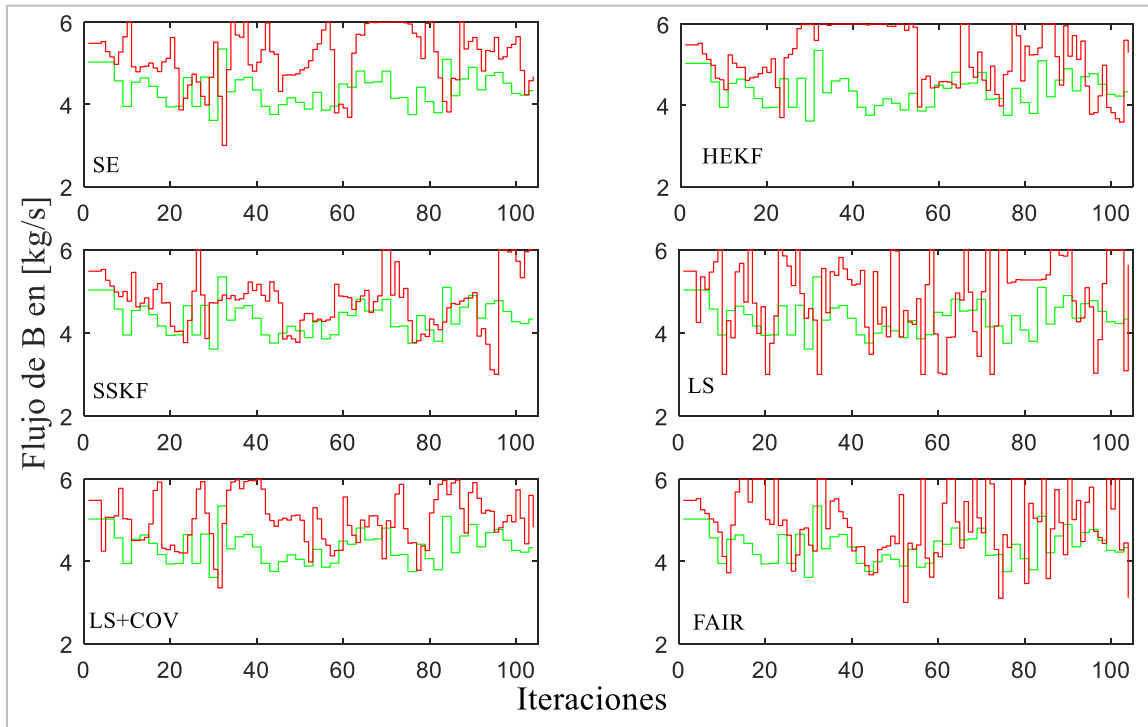


Figura 6.45. Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación con perturbaciones cada 2 ciclo de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.

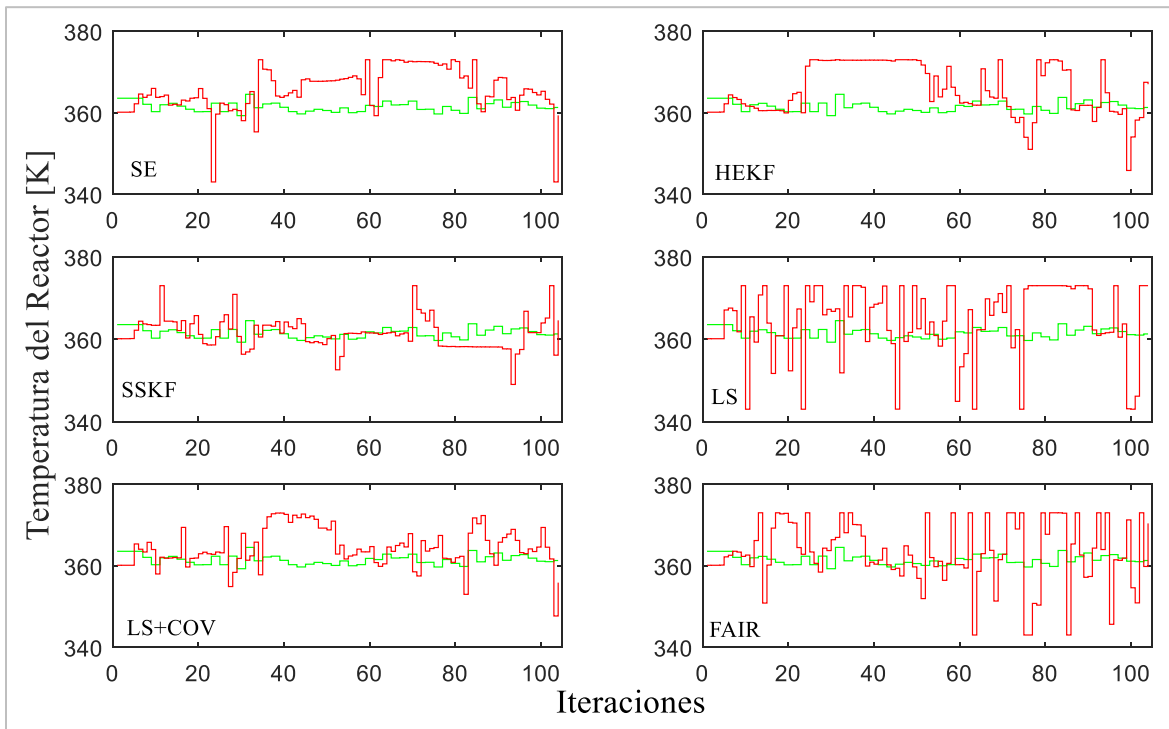


Figura 6.46. Comparación de la variable de decisión 2 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación con perturbaciones cada 2 ciclo de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.

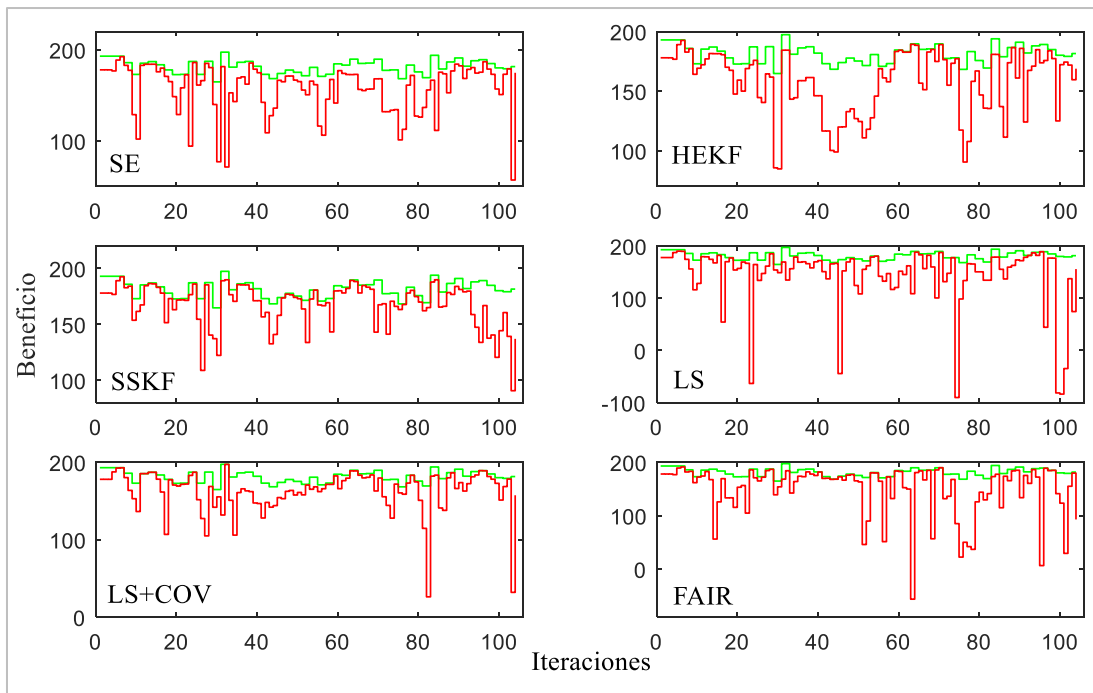


Figura 6.47. Comparación del beneficio obtenido con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación con perturbaciones cada 2 ciclo de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.

Se observa en la Figura 6.45 y Figura 6.46 una cierta mejora en los casos de HEKF y LS+COV, en los cuales en algunos pasajes de las iteraciones se tienen valores similares al óptimo del proceso. Esto se debería a que es posible mejorar la estimación de los gradientes dado que durante el periodo donde el flujo de A es constante, obteniendo $\mathcal{D}_k = 0$ en la Ecuación 3.5, por lo que no hay influencia de las perturbaciones en la Ecuación 3.1, teniendo HEKF los mejores resultados entre ambos. Al igual que en el caso para cada 1 ciclo, los mejores resultados se obtienen en las iteraciones donde las perturbaciones tienen una tasa de cambio menor y una tendencia definida.

En general, la mejora se debería a la metodología MA Dual que, como se observó en las perturbaciones tipo escalón, a medida que aumenta el tiempo entre perturbaciones esta es capaz de sobrellevar las perturbaciones sumado a una mejora en la estimación de los gradientes con la ayuda de los estimadores. Lo anteriormente descrito se puede complementar con la información presentada en la Tabla 6.7 y Tabla 6.8

Tabla 6.7. Errores porcentuales en la estimación del valor de F_A para los caminos 1 y 2, con una tasa de cambio de 2 ciclos de RTO.

Metodología	Realización 1 [%]	Realización 2 [%]
HEKF	4,35	5,62
SSKF	7,54	8,07
LS	14,75	14,75
LS+ COV	24,24	22,47
FAIR	15,04	15,19

Tabla 6.8. Errores porcentuales en la estimación del valor de F_A para los caminos 3 y 4, con una tasa de cambio de 2 ciclos de RTO.

Metodología	Realización 3[%]	Realización 4[%]
HEKF	3,23	3,23
SSKF	7,93	7,93
LS	15,4	21,02
LS+ COV	23,01	21,35
FAIR	16,34	20,86

En ambas tablas se observan resultados similares para el resto de las realizaciones para la estimación del flujo de A. Para la obtención de las variables de decisión se puede ver en la Tabla 6.9 y Tabla 6.10 que se comienza a tener casos donde los estimadores de perturbaciones permite obtener mejores resultados, con óptimos del proceso que se asemejan a los del modelo.

Tabla 6.9. Errores porcentuales en la obtención de las variables de decisión para los caminos 1 y 2 como una tasa de cambio de 2 a 3 ciclos de RTO.

	C1		C2	
	Cada 2 Iteración		Cada 2 Iteración	
Metodología	F_B [%]	T [%]	F_B [%]	T [%]
SE	22,5	1,54	19,91	1,28
HEKF	22,48	1,67	24,31	1,68
SSKF	14,6	0,84	21,85	1,47
LS	21,67	2,16	21,39	2,25
LS+ COV	18,14	1,25	15,49	0,95
FAIR	17,57	1,71	14,22	1,18

Tabla 6.10. Errores porcentuales en la obtención de las variables de decisión para los caminos 3 y 4 como una tasa de cambio de 2 ciclos de RTO.

	C3		C4	
	Cada 2 Iteración		Cada 2 Iteración	
Metodología	F_B [%]	T [%]	F_B [%]	T [%]
SE	15,7	1,09	14,78	0,8
HEKF	15,44	1,28	19,48	1,71
SSKF	18,01	0,56	14,26	0,81
LS	23,96	2,27	20,09	1,83
LS+ COV	22,19	1,6	14,47	1,22
FAIR	24,94	2,35	21,5	1,89

En todos los caminos se tiene al menos un estimador de perturbación que permitió tener un porcentaje menor o semejante al error de SE. Esto se debería que, al comenzar a tener más iteraciones para el cálculo de los gradientes, estos tendrían una mejor estimación, beneficiando la RTO.

Para las restricciones del componente A y G se muestran la Figura 6.48 y la Figura 6.49 respectivamente, donde se puede observar que la inclusión de los modificadores no mejora el cumplimiento de las restricciones, incluso empeorando su rendimiento. Lo anterior se debe a que la estimación de perturbaciones no mejora el cálculo de los gradientes y a la vez la obtención de las variables de decisión que optimizan el proceso.

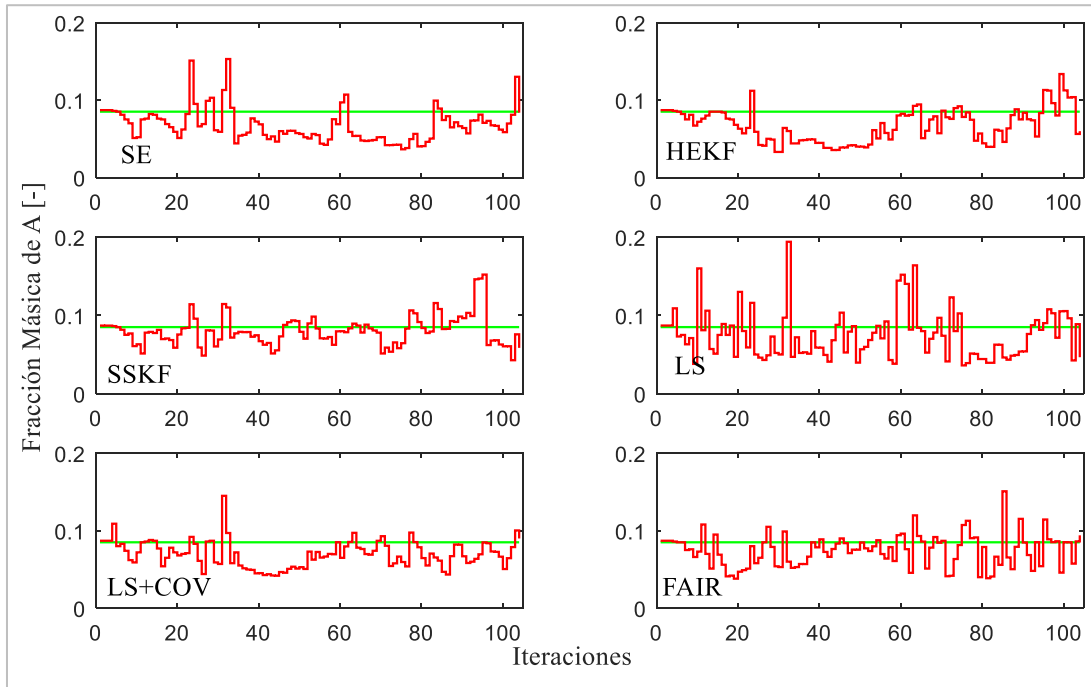


Figura 6.48. Comparación de la evolución de la fracción másica de A (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclo para la realización 1.

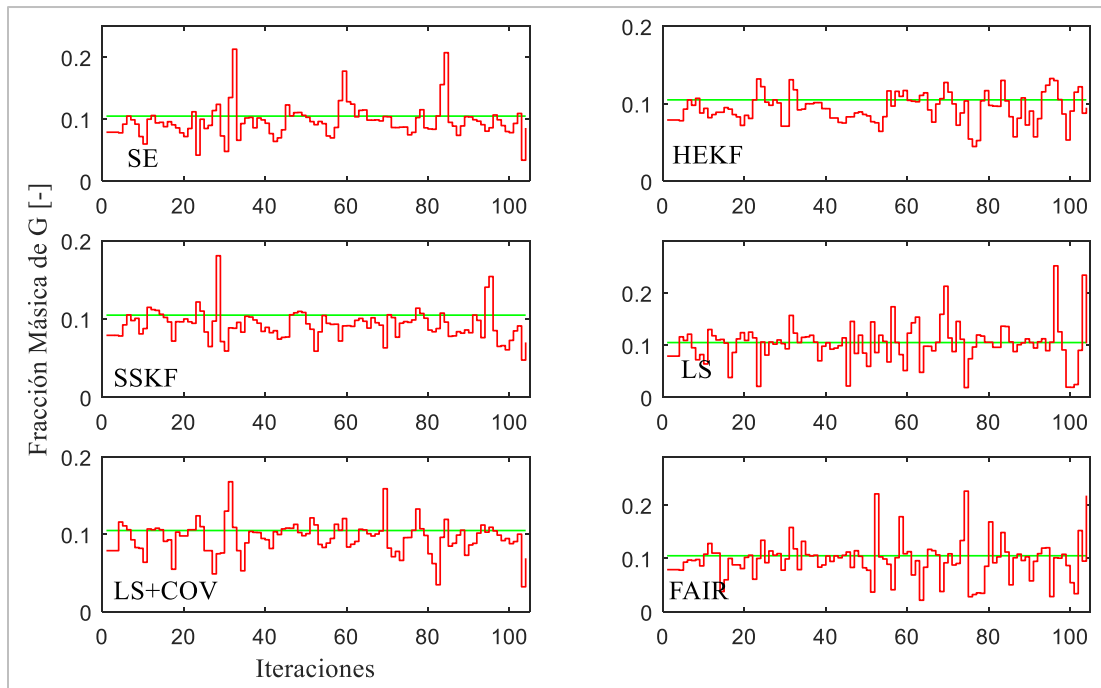


Figura 6.49. Comparación de la evolución de la fracción másica de G (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 2 ciclo para la realización 1.

6.5.3 Cada 3 ciclos o más de RTO

En la Figura 6.50 y la Figura 6.51 se observa que la metodología dual logra seguir la trayectoria del óptimo del proceso, obteniendo resultados similares. En especial se destaca C3, que correspondería a una realización que tiene una tasa de cambio en el flujo de A más bajo, por lo que la aproximación sé que utiliza para calcular los gradientes se vería favorecida.

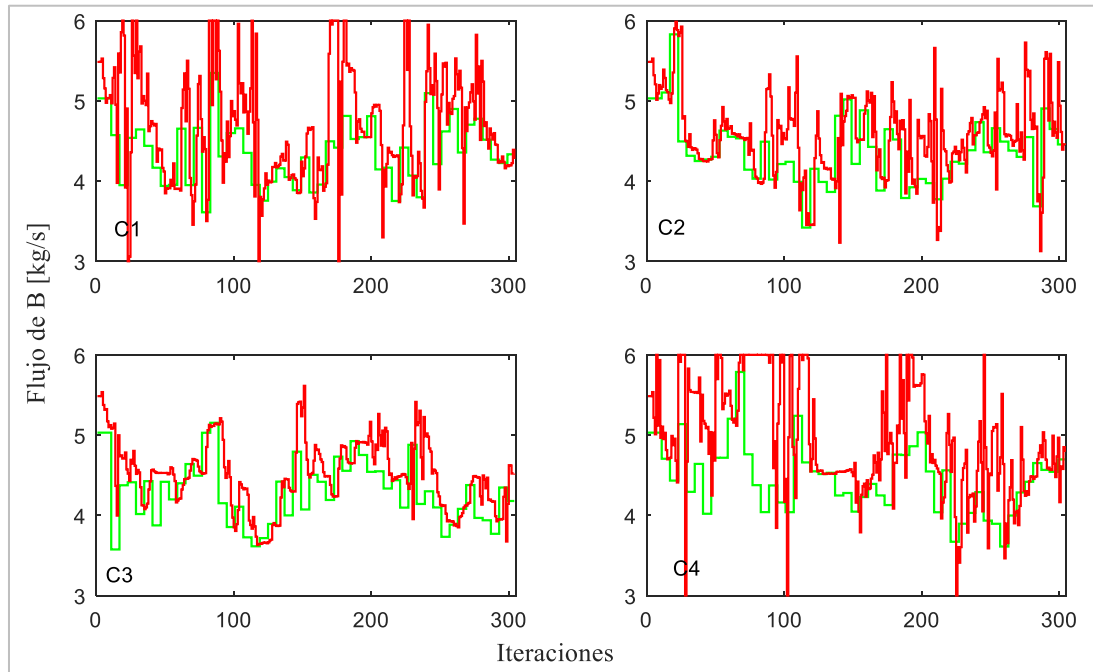


Figura 6.50. Evolución de la variable de decisión 1 (Flujo de B) en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 6 ciclos de RTO.

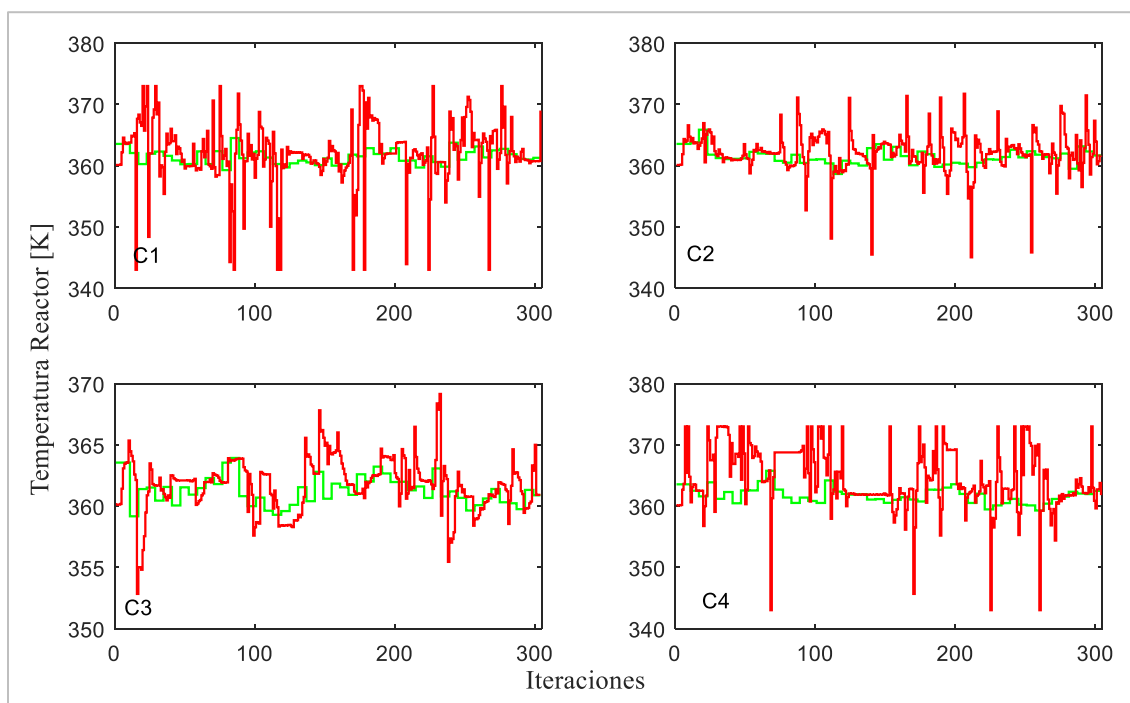


Figura 6.51. Evolución de la variable de decisión 2 (Temperatura) en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 6 ciclos de RTO.

Para analizar el beneficio obtenido se muestra la Figura 6.52:

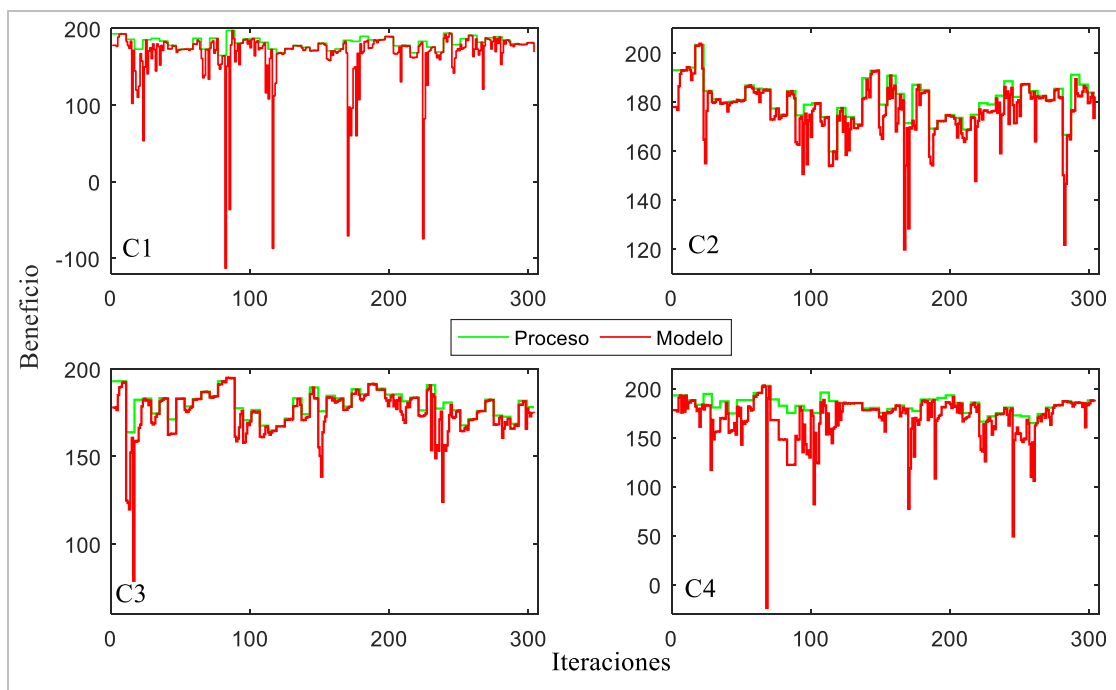


Figura 6.52. Evolución del beneficio en los distintos caminos generados con la función ARIMA, con perturbaciones cada 6 ciclo de RTO.

En esta imagen se aprecia una cierta mejora que se debería a su comportamiento con cambios más bajos y tendencia definida durante algunas iteraciones, sumado a la mayor cantidad de iteraciones en las cuales las perturbaciones se mantuvieron con un valor constante. C2 y C3 presentarían una menor cantidad de *peak* ya que tiene en muchas iteraciones una tasa de cambio menor, en comparación con C1 y C4.

Las restricciones de la realización 1 se muestran en la Figura 6.53. Aquí se observa que aun cuando los resultados en la obtención de las variables de decisión que optimizan el proceso se siguen obteniendo puntos infactibles que infringen las restricciones, lo cual es de esperar en esta metodología según la bibliografía.

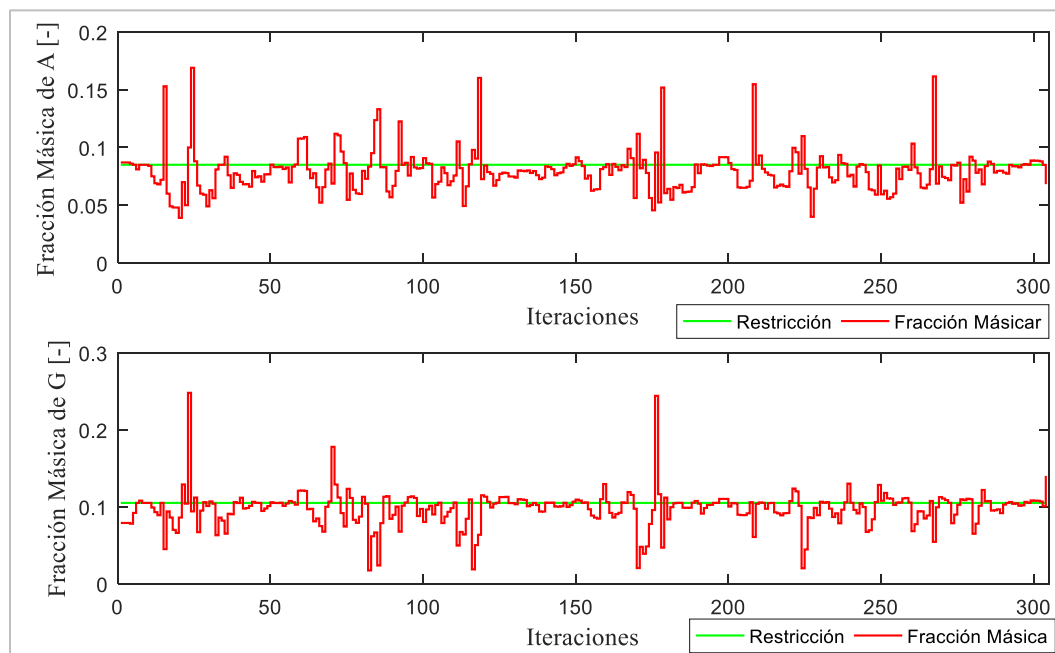


Figura 6.53. Evolución de las fracciones másicas (rojo) y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclos para la realización 1.

Respecto a la estimación de las perturbaciones en el caso la realización 1, HEKF sigue siendo el que estima mejor el valor del flujo de A, esto se muestra en la Figura 6.54. Se obtiene los mismos resultados para la realización 2 (ver la Figura 11.1 del apéndice C), lo cual también se puede ver en la Tabla 6.11 y la Tabla 6.12 con los errores promedio en la estimación del flujo de A:

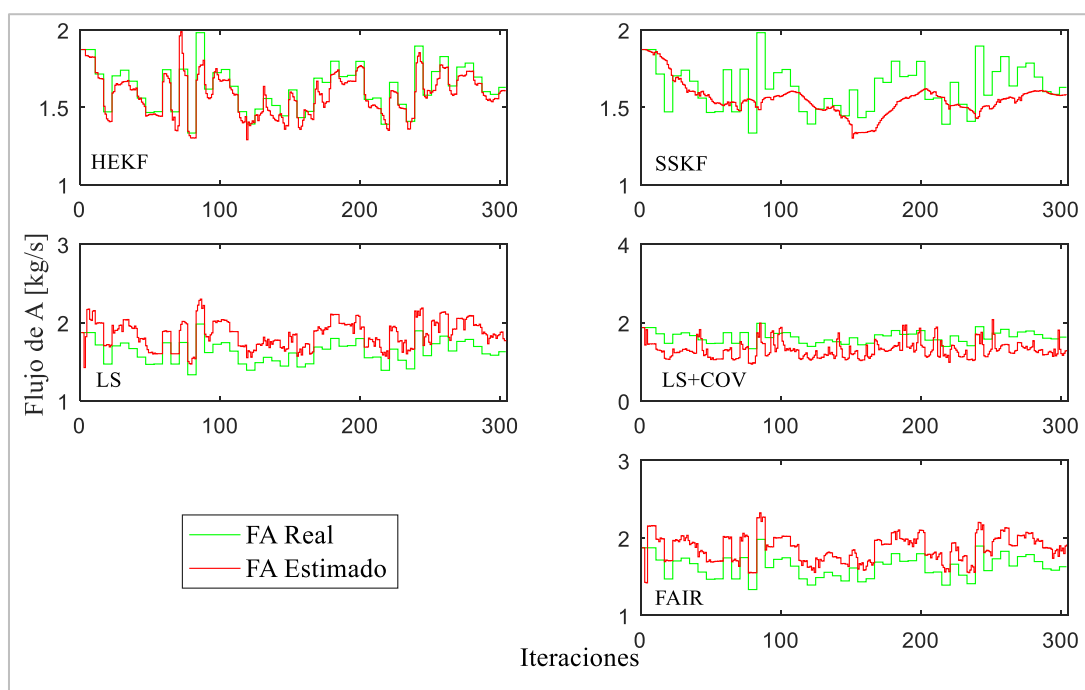


Figura 6.54. Comparación de del valor estimado para F_A obtenida con los distintos estimadores de perturbaciones con perturbaciones cada 6 ciclos de RTO para la realización 1.

Tabla 6.11. Errores porcentuales en la estimación del valor de F_A para los caminos 1 y 2, con una tasa de cambio de 3 a 6 ciclos de RTO.

	C 1				C 2			
Metodología	Cada 3 ciclos	Cada 4 ciclos	Cada 5 ciclos	Cada 6 ciclos	Cada 3 ciclos	Cada 4 ciclos	Cada 5 ciclos	Cada 6 ciclos
HEKF	3,32	3,86	3,77	3,23	3,15	3,22	3,24	3,38
SSKF	7,26	7,74	7,04	7,69	7,59	7,06	6,70	7,26
LS	15,02	14,61	14,62	14,10	14,36	14,89	14,96	14,75
LS+COV	23,09	22,81	22,20	21,39	23,24	23,58	22,71	22,94
FAIR	14,98	14,92	14,97	15,05	15,49	18,62	15,47	15,05

Tabla 6.12. Errores porcentuales en la estimación del valor de F_A para los caminos 3 y 4, con una tasa de cambio de 3 a 6 ciclos de RTO.

	C 3				C 4			
Metodología	Cada 3 ciclos	Cada 4 ciclos	Cada 5 ciclos	Cada 6 ciclos	Cada 3 ciclos	Cada 4 ciclos	Cada 5 ciclos	Cada 6 ciclos
HEKF	3,65	2,63	2,84	2,92	4,23	2,67	3,27	3,72
SSKF	7,26	6,94	7,18	7,78	6,91	6,76	6,44	6,20
LS	15,13	14,52	14,99	15,00	14,22	13,77	14,09	14,21
LS+COV	23,23	22,24	22,18	22,03	23,59	23,66	22,95	23,02
FAIR	15,61	15,67	15,06	15,50	14,92	16,28	15,73	15,24

Respecto a las variables de decisión, para la realización 1 no se logra diferenciar una mejora clara con la inclusión de estimadores ni que alguno logre obtener óptimos similares a los del proceso a lo largo de las iteraciones, esto se muestra en la Figura 6.55 y la Figura 6.56:

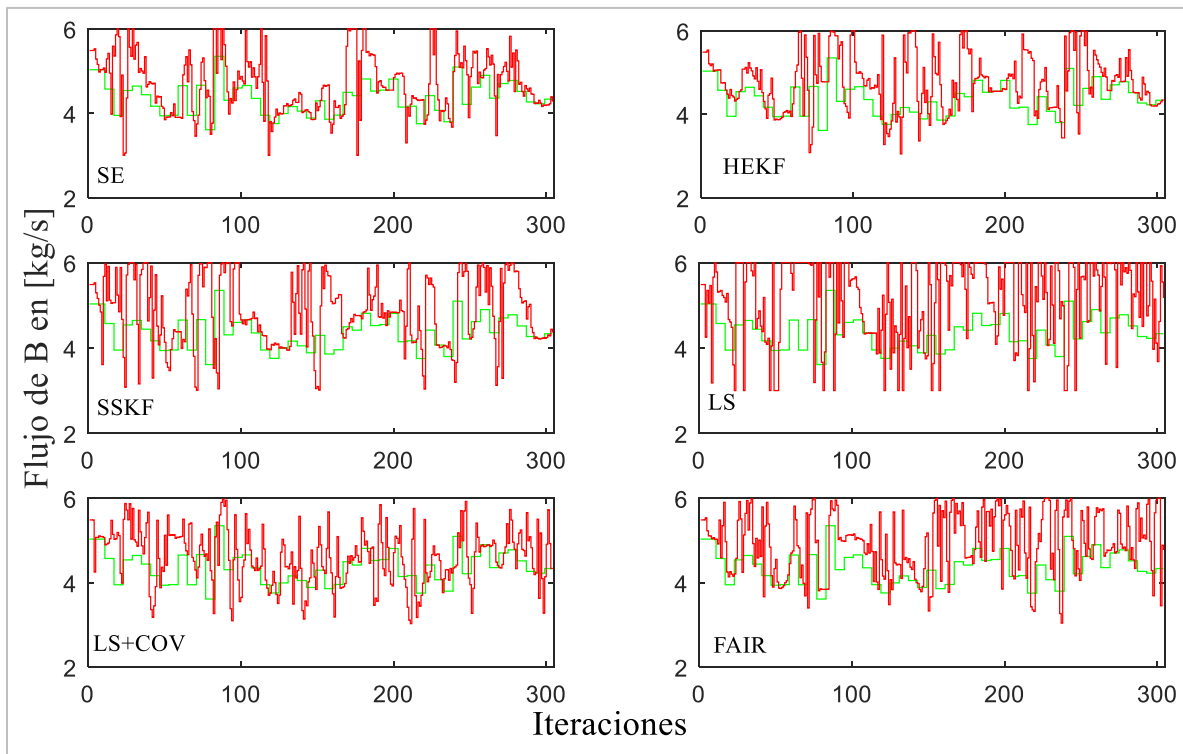


Figura 6.55 Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación. Para la realización 1 con una tasa de cambio de cada 6 iteraciones. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.

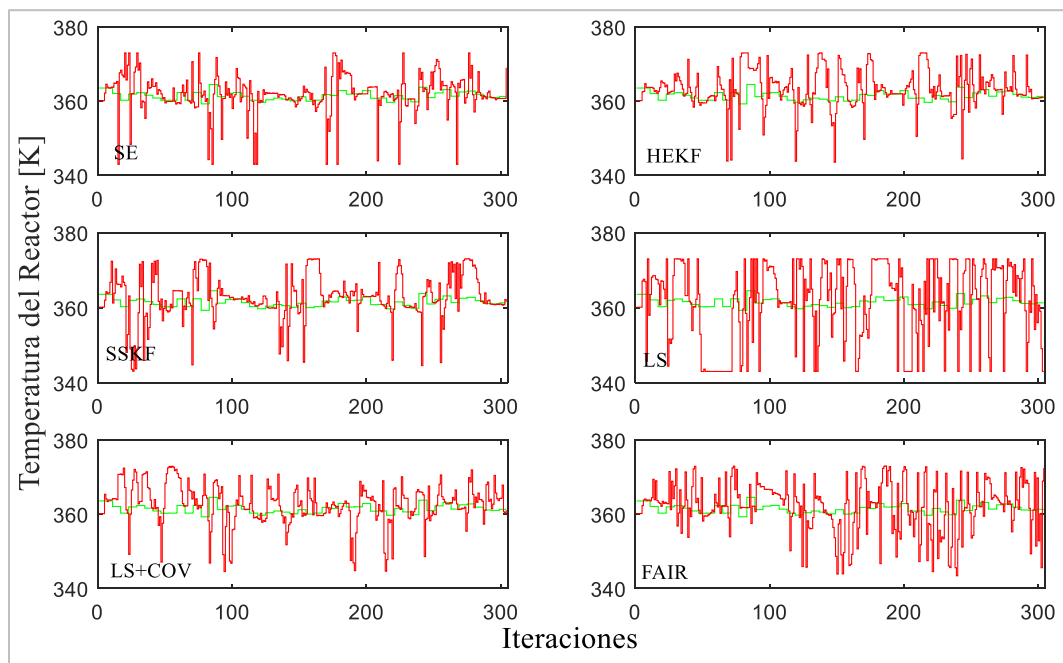


Figura 6.56. Comparación de la variable de decisión 2 (temperatura del Reactor) obtenida al incluir las distintas metodologías de estimación de perturbaciones incluidas cada 6 ciclos de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.

Para el beneficio obtenido en la Figura 6.57, se observa un comportamiento similar entre SE, HEKF y LS+COV:

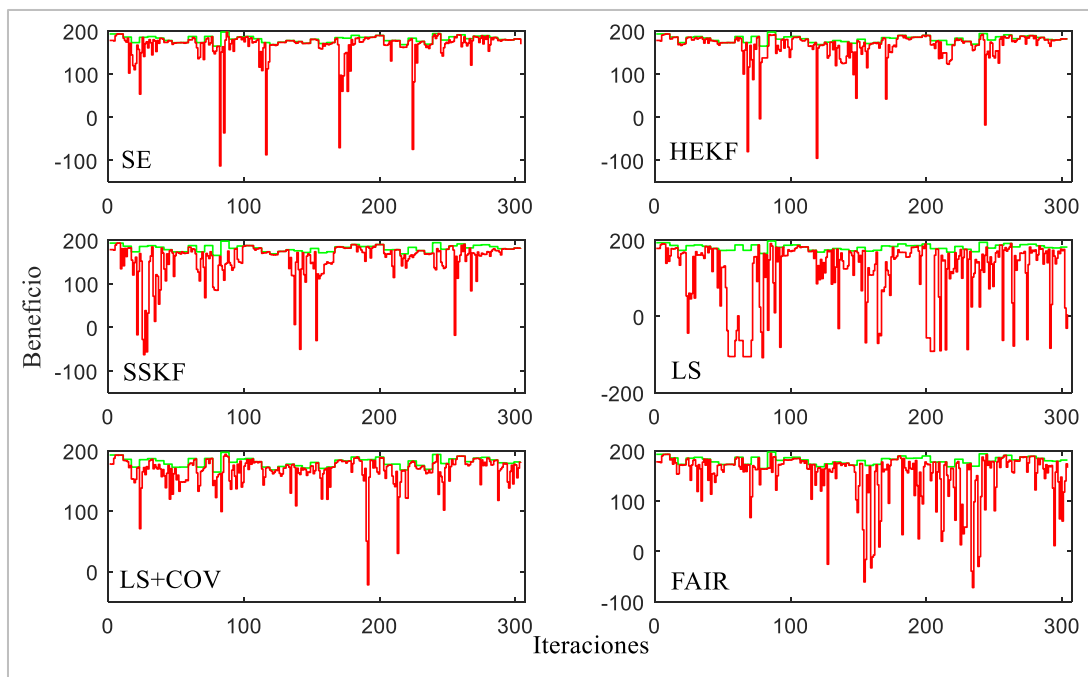


Figura 6.57. Comparación del beneficio obtenido al incluir las distintas metodologías de estimación de perturbaciones incluidas cada 6 ciclos de RTO para la realización 1. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.

En la Tabla 6.13, se muestra que solo en algunos casos el error promedio en la estimación de una de las variables de decisión es menor que SE.

Tabla 6.13. Errores porcentuales en la estimación de las variables de decisión para la realización 1, con una tasa de cambio de 3 a 6 ciclos de RTO.

	Cada 3 Iteración		Cada 4 Iteración		Cada 5 Iteración		Cada 6 Iteración	
Metodología	$F_B\%$	$T_R\%$	$F_B\%$	$T_R\%$	$F_B\%$	$T_R\%$	$F_B\%$	$T_R\%$
Sin Estimador	25,79	2,23	12,04	0,92	13,26	0,96	10,87	0,92
HEKF	13,72	1,04	15,09	1,24	15,24	1,26	12,86	1,05
SSKF	25,72	1,92	21,74	1,58	14,66	1,07	16,78	1,18
LS	22,74	2,09	19,81	2,07	22,96	2,26	24,21	2,40
LS+ COV	15,71	0,99	13,98	1,17	10,33	0,71	12,50	1,09
Fair	21,70	1,85	17,62	1,65	18,36	1,73	16,06	1,40

Para la realización 2, HEKF y LS+COV logran obtener óptimos similares los del proceso, como se muestra en la Figura 6.58. Sin embargo, no se logra observar una mejora clara respecto a SE.

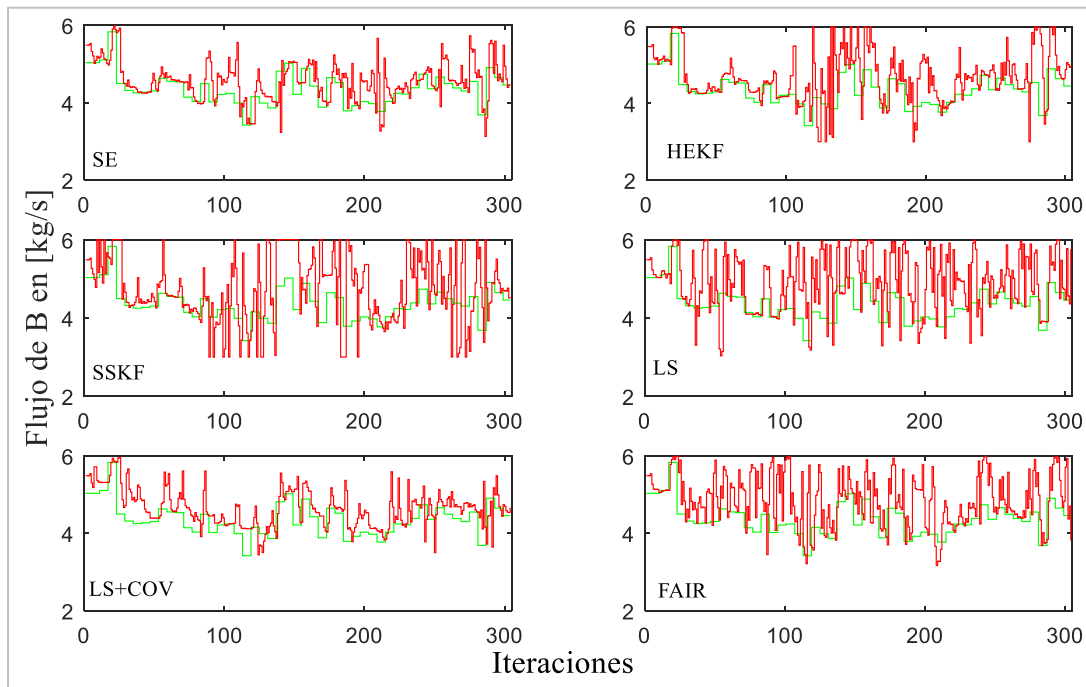


Figura 6.58. Comparación de la variable de decisión 1 obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación. Para la realización 2 con una tasa de cambio de cada 6 iteraciones. En color verde se muestra el óptimo del proceso y en color rojo el óptimo del modelo.

Comparando los errores porcentuales en la Tabla 6.14 se puede observar que HEKF y LS+COV obtienen un error menor o similar a SE.

Tabla 6.14. Errores porcentuales en la estimación de las variables de decisión para el camino 2, con una tasa de cambio de 3 a 6 ciclos de RTO.

Metodología	Cada 3 Iteración		Cada 4 Iteración		Cada 5 Iteración		Cada 6 Iteración	
	$F_B\%$	$T_R\%$	$F_B\%$	$T_R\%$	$F_B\%$	$T_R\%$	$F_B\%$	$T_R\%$
Sin Estimador	16,51	1,20	14,12	0,93	9,92	0,81	8,19	0,62
HEKF	9,31	1,29	11,78	1,00	13,45	0,96	10,47	0,84
SSKF	24,39	1,77	12,15	0,80	12,58	0,95	15,15	1,31
LS	18,94	1,66	20,67	1,96	17,50	1,53	16,57	1,54
LS+ COV	14,21	0,99	11,87	0,75	10,65	0,70	9,04	0,62
Fair	12,43	0,80	13,47	0,90	11,28	0,83	13,80	1,25

Estos resultados podrían ser más atribuibles a las propiedades del algoritmo de MA Dual que a la incorporación de los estimadores de perturbación, ya que como se observó en el caso de las perturbaciones tipo escalón, con una tasa de cambio sobre los 3 ciclos de RTO se obtienen mejores resultados sin estimador. Para el caso de las perturbaciones efectuadas con la función ARIMA, con una tasa de cambio similar a la RTO, la inclusión de estimadores no logra mejorar el desempeño de la RTO. No obstante, si las perturbaciones tienen una tasa de cambio mayor a la ejecución de un ciclo de RTO, la inclusión de los estimadores de perturbación podrían igualar o mejorar la obtención de un óptimo del modelo que se parezca al del proceso, como se da en específico con LS+COV en C2 (ver Figura 6.58).

Respecto a las restricciones, se muestran la Figura 6.59 y Figura 6.60, para la composición de A y G respectivamente. Se puede observar para ambos casos que las restricciones son infringidas en reiteradas ocasiones y que no se observa en ningún caso una mejora respecto a SE, mismo resultado que se ha mantenido en los otros casos estudiados. Esto se debería a que las perturbaciones le dan inestabilidad al proceso no permitiéndole al algoritmo Dual seguir una trayectoria sin puntos infactibles.

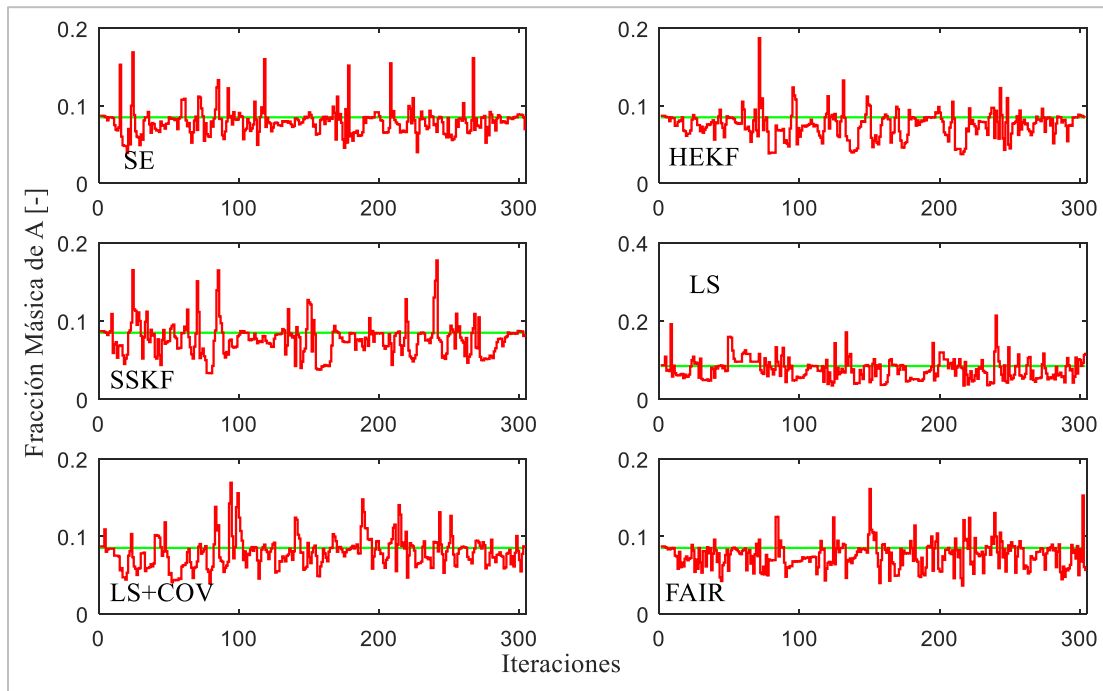


Figura 6.59. Comparación de la evolución de la fracción máscas de A (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclo para la realización 1.

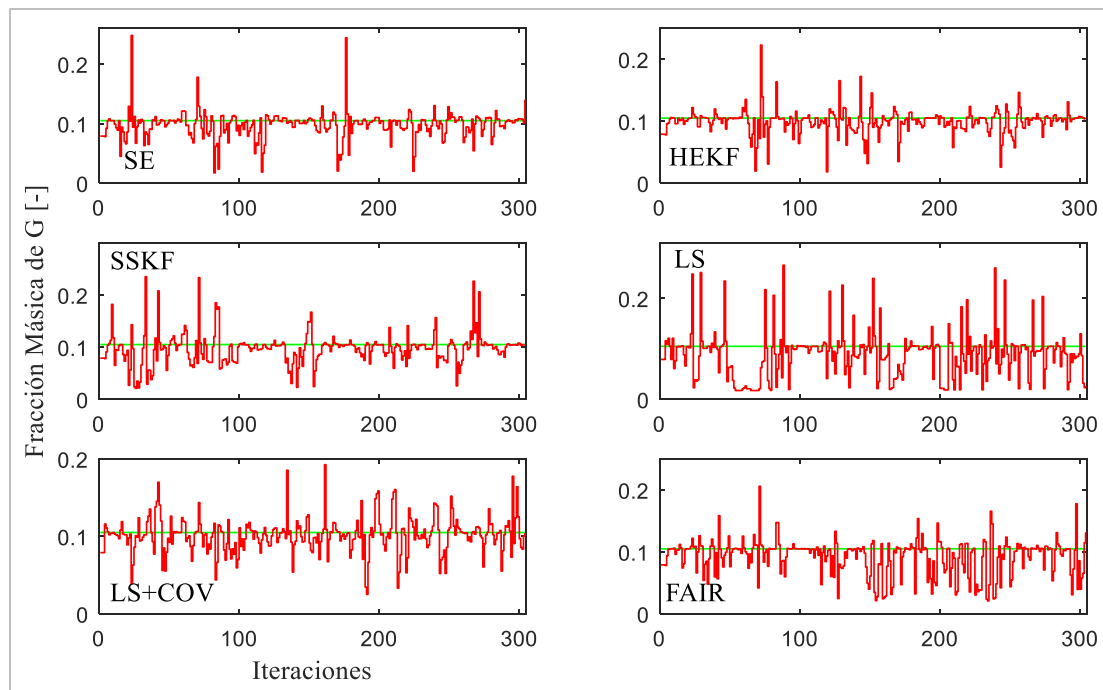


Figura 6.60. Comparación de la evolución de la fracción máscas de G (rojo) obtenida con la inclusión de los distintos estimadores de perturbación y su respectiva restricción (verde) en función de las iteraciones con perturbaciones cada 6 ciclo para la realización 1.

7. Propuesta de sistema experimental a escala laboratorio

Realizar pruebas en simulación permiten tener una aproximación del comportamiento que se espera para un sistema o proceso real. Pero dado que los modelos no representan de forma exacta la fenomenología que se intenta describir o que en simulación no es posible agregar el efecto de todas las variables que influyen en un proceso, es necesario realizar pruebas experimentales en un sistema real de laboratorio para comparar con los resultados obtenidos en simulación y de esta forma darle validez a los supuestos o aproximaciones utilizadas. Es por esto que, a continuación, se presenta una propuesta de un sistema experimental a escala laboratorio con el fin de contrastar los resultados antes mostrados.

7.1 Equipos disponibles

El sistema experimental que se propone a continuación corresponde al reactor Otto Williams a escala laboratorio, que actualmente se encuentra implementado en el Laboratorio de Optimización del Departamento de Ingeniería Química y ambiental de la Universidad Técnica Federico Santa María, Campus San Joaquín. Este reactor consta de un recipiente de aluminio de 15 litros de capacidad, con 27.5 cm de altura y un diámetro de 23 cm (1). Este reactor cuenta con una válvula de bola en zona inferior (1.5 cm del fondo) y otra válvula de bola en su zona superior (21 cm del fondo). Además, se cuenta con 2 bombas peristálticas que son utilizadas para el flujo de alimentación (2) y de descarga (3). El sistema de refrigeración del sistema corresponde a un serpentín de cobre (4), por el cual se hace circular agua como refrigerante, que es impulsado por una tercera bomba peristáltica (5). Como sistema de calefacción se cuenta con una resistencia eléctrica de 2000 W de potencia (6). También se dispone de un agitador mecánico (7) para homogenizar el interior del reactor, y para las mediciones de temperatura se utiliza una PT100 (8).

La propuesta corresponde a un sistema híbrido donde la hidrodinámica del sistema es representada con agua de cañería y los cambios fisicoquímicos obtenidos son simulados mediante el software MatLab®. A continuación, se presenta la Figura 7.1 y Figura 7.2, que corresponde al montaje experimental del laboratorio y su P&ID respectivamente.

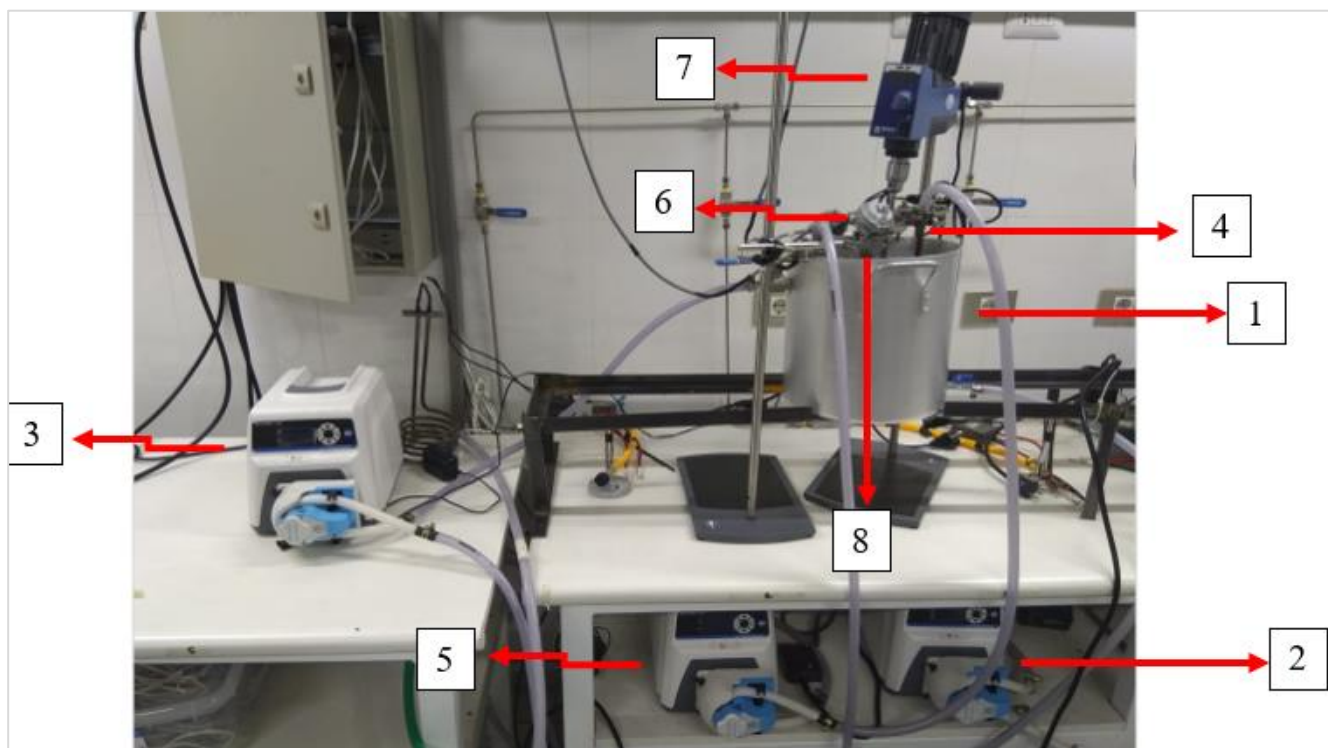


Figura 7.1. Montaje experimental disponible en el Laboratorio de Optimización de la Universidad Técnica Federico Santa María Campus San Joaquín.

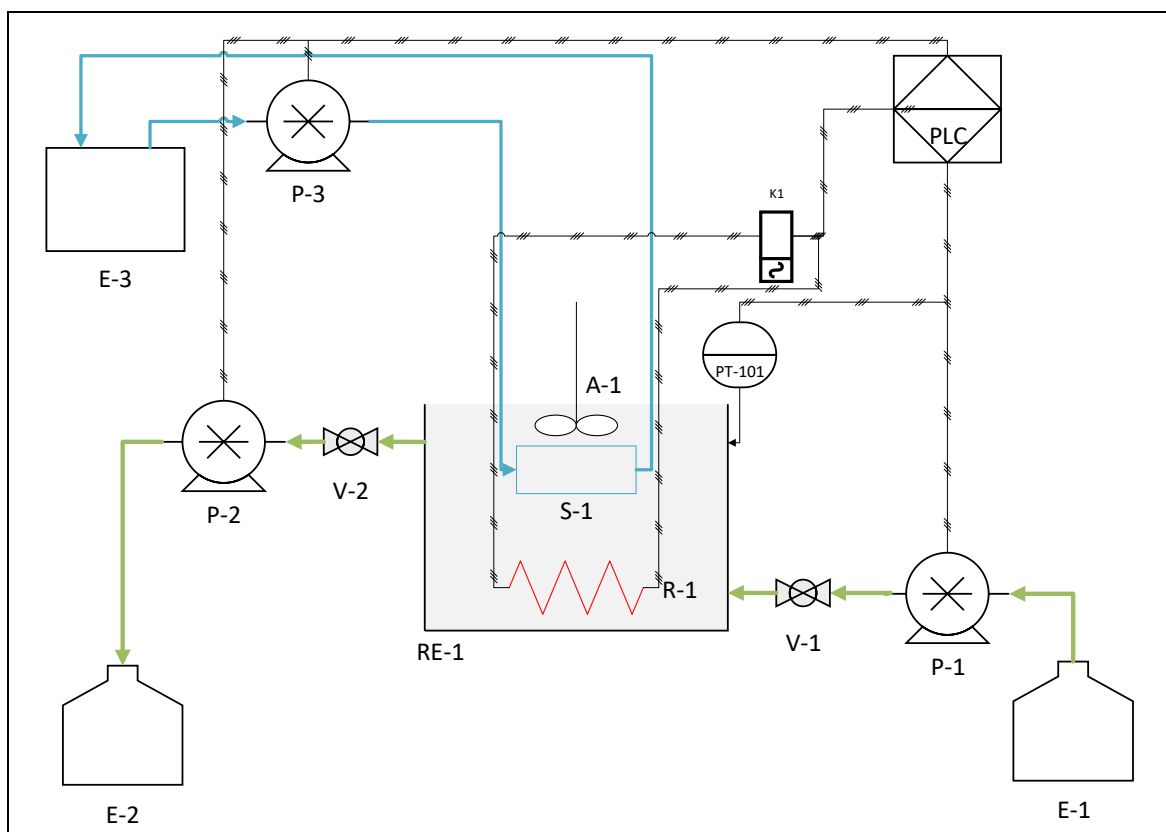


Figura 7.2. P&ID del Reactor de Otto Williams disponible en el Laboratorio de Optimización de la Universidad Técnica Federico Santa María Campus San Joaquín. En verde se representa la corriente de alimentación y descarga del reactor, en azul la corriente de refrigeración y en rojo la resistencia encargada de la calefacción del reactor.

Tabla 7.1. Simbología, instrumentos y descripción del montaje experimental disponible en el Laboratorio de Optimización de la Universidad Técnica Federico Santa María Campus San Joaquín

Simbología	Instrumento	Descripción
E-1	Estanque	Agua de alimentación
E-2	Estanque	Descarga del reactor
E-3	Estanque	Agua de refrigeración
P-1	Bomba peristáltica	Bomba de alimentación
P-2	Bomba peristáltica	Bomba de descarga
P-3	Bomba peristáltica	Bomba de refrigeración
V-1	Válvula de bola	Válvula de alimentación
V-2	Válvula de bola	Válvula de descarga
PT-101	PT-100	Medidor de temperatura
R-1	Resistencia	Sistema de calefacción
RE-1	Reactor	Reactor de Otto Williams
A-1	Agitador	Agitador mecánico
S-1	Serpentín	Sistema de enfriamiento
K-1	Relé	Regulador de voltaje

Tabla 7.2. Modelo de los equipos disponibles en el Laboratorio de Optimización de la Universidad Técnica Federico Santa María Campus San Joaquín

Equipo	Modelo
Bomba peristáltica	Masterflex 07528-10. Cabeza 77800-52
Resistencia	Helical 2000W/220V
Agitador	Boeco OSD-20 S65
PT-100	VT-DKSGD-100L-1

Para programar la lógica de control se dispone con un PLC FATEK FBs-20MAR-2AC conectado a 5 módulos: FBs-RTD donde se conectan las PT-100, FBs 6TC al cual se conectan 4 bombas y un FBs 4DA al que se conectan 2 bombas y 4 resistencias. Este puede controlar las bombas peristálticas y tomar mediciones con la PT-100 disponible. El agitador mecánico debe ser encendido y ajustado de forma manual. Además, se cuenta con un baño termostático que tiene su propio control PID interno, en el cual se puede fijar la temperatura a la que se desea utilizara para el flujo de alimentación.

7.2 Escalamiento de parámetros

Para utilizar este montaje experimental es necesario escalar los parámetros del proceso y modelo para que se ajusten a los flujos y temperaturas que pueden ser alcanzados en el laboratorio y así obtener resultados comparables con los de la simulación.

Primero, se fija el máximo de operación para el flujo de alimentación en un 70% del flujo máximo más bajo alcanzado por todas las bombas del laboratorio. Según los resultados obtenidos por la calibración de estas, se obtuvo un valor cercano a los 28.5 ml/s , con lo que se fija el valor máximo de trabajo en 20 ml/s y estableciendo como mínimo 5 ml/s . Para la temperatura primero se hizo un estudio del comportamiento del baño termostático en conjunto con la resistencia eléctrica, de tal manera que no se saturen los recursos y se puedan fijar temperaturas alcanzables en función de los equipos disponibles, además de evitar problemas por altas temperatura en los equipos (como la precipitación de sales). Con base en esto, se definió un rango de temperatura de un máximo de 20°C y una mínima de 5°C .

Dado que en el laboratorio no se cuenta con una cuarta bomba, se asume que la bomba de alimentación hace ingresar los compuestos A y B en forma simultánea por una única corriente. Por lo que en el escalamiento se deben mantener las proporciones en masa de A y B en la alimentación. Para esto, en base los flujos trabajados en simulación para F_A se establecieron las proporciones para todos los flujos, teniendo que en promedio A es el 27% en masa de la alimentación y B el resto.

Luego como se conocen los límites superior e inferior en ml/s utilizando la densidad del agua se llevan a kg/s y son escalados de tal manera de tener una tasa de cambio similar a los reales y mantener la misma proporción en la alimentación. Los resultados se ven en la Tabla 11.2 del anexo D. Para la temperatura se sigue el mismo procedimiento.

Con estos datos se realiza un procedimiento de mínimos cuadrados, donde se busca minimizar la suma de la diferencia al cuadrado de las composiciones obtenidas en el óptimo del proceso normal y del proceso escalado, modificando los parámetros del sistema escalado según la Ecuación 7.1.

$$\min_{\alpha_e} (X_{i,n} - X_{i,e})^T (X_{i,n} - X_{i,e}) \quad 7.1$$

El subíndice n hace referencia a los valores del proceso sin escalar y el subíndice e a los valores en el sistema escalado y X_i corresponde a la fracción másica de i en el óptimo. El mismo procedimiento se realizó para escalar los parámetros del modelo. Los parámetros obtenidos se presentan en la Tabla 7.3.

Tabla 7.3. Parámetros escalados obtenidos para el proceso y el modelo.

Parámetro Proceso escalado	Valor	Unidades	Parámetro Modelo escalado	Valor	Unidades
k_1^0	1.81×10^6	$kg/(l\ s)$	$\tilde{k}_1$	1.00×10^6	$kg/(l\ s)$
k_2^0	8.54×10^8	$kg/(l\ s)$	$\tilde{k}_2$	2.60×10^{11}	$kg/(l\ s)$
k_3^0	2.97×10^{12}	$kg/(l\ s)$	$\widetilde{EA}_1$	-6.86×10^4	K
EA_1	-5.67×10^3	K	$\widetilde{EA}_2$	-1.0×10^4	K
EA_2	-7.10×10^3	K			
EA_3	-9.32×10^3	K			

Para comprobar que estos parámetros funcionan, son probados en simulación con adaptación de modificadores Dual, obteniendo los resultados de la Figura 7.3.

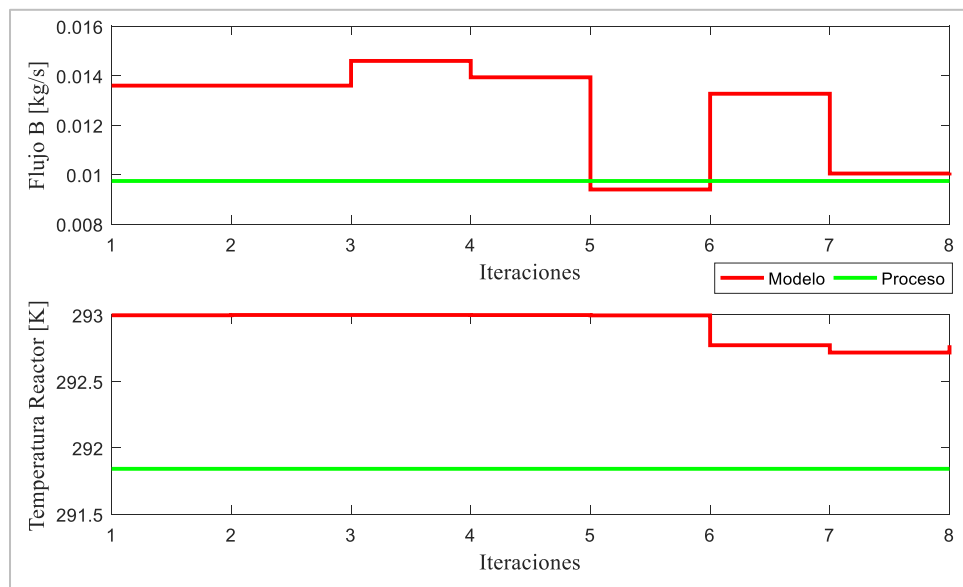


Figura 7.3. Variables de decisión obtenidas en el sistema escalado. En verde presenta el óptimo del proceso y en rojo los óptimos obtenidos con el modelo.

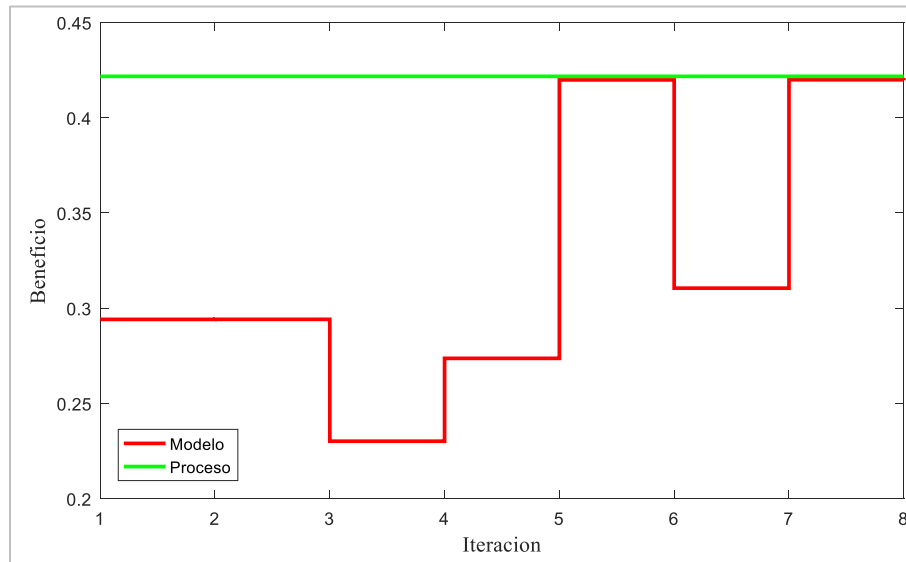


Figura 7.4. Beneficio obtenido con el sistema escalado.

En las figuras anteriores se puede observar con los parámetros escalados la RTO logra seguir de la variable de decisión 1 llegando a un valor cercano al óptimo del proceso, sin tener el mismo resultado para la variable de decisión 2. Esto se debería a que el rango de variación que se utilizó para escalar la temperatura es muy acotado, y como se vio en el análisis de cómo afecta el flujo de A en las variables de decisión, la temperatura no genera grandes cambios. Para obtener un mejor escalamiento se sugiere definir un rango de temperatura más amplio o bien probar los parámetros con otra metodología de RTO como la anidada. Sin embargo, con la variable de decisión 1 es suficiente para tener un beneficio similar al óptimo del proceso.

Es importante recalcar que los parámetros obtenidos son muy dependientes de los iteradores iniciales, pudiendo variar en ordenes de magnitud, por lo que es necesario obtener y comprobar constantemente los parámetros para asegurar que estos sean útiles para el Reactor de Otto Williams.

8. Conclusiones

Se estudiaron e implementaron metodologías de estimación de perturbaciones, las cuales fueron incorporadas en la optimización en tiempo real con adaptación de modificadores cumpliendo el objetivo general de este trabajo. Se pudo observar que la inclusión de perturbación al proceso afecta el desempeño de la RTO con adaptación de modificadores, bajando su tasa de convergencia con el óptimo del proceso, debido que los constantes cambios perjudican la estimación de los gradientes utilizados para calcular los modificadores basados en gradientes, afectando la búsqueda de las variables de decisión.

Se definió como proceso base para el estudio del efecto de las perturbaciones en la RTO con adaptación de modificadores al Reactor de Otto Williams, el cual consta de un modelo que representa el funcionamiento real del equipo y otro que presenta incertidumbre estructural, haciendo posible estudiar el funcionamiento de la RTO. Se estudiaron e implementaron dos metodologías de estimación de perturbaciones: mínimos cuadrados con 3 propuestas distintas y Filtro de Kalman Extendido con 2 propuestas distintas.

Al implementar los sistemas de estimación de perturbaciones para el caso de la perturbación escalón se logró mejorar la obtención del óptimo para las perturbaciones realizadas en una escala de tiempo similar a la ejecución de la RTO, teniendo los mejores resultados la propuesta 3 de mínimos cuadrados (FAIR) con un error promedio del 8% y 1%, para la estimación del flujo de B y temperatura respectivamente. Esto se debería a que la propuesta FAIR obtiene valores del flujo de A que permiten que el modelo obtenga valores similares de composición al proceso real, y que además tienen una tasa de cambio similar a la real, con lo que se obtiene un gradiente del proceso más representativo. Para casos donde la perturbación tiene una frecuencia de cambio mayor que la ejecución de la RTO la inclusión de los estimadores no logro mejorar el rendimiento de la RTO, teniendo el mejor resultado sin la inclusión de los estimadores. Esto se debe a que los estimadores entregan valores distintos en el periodo en que perturbación es constante, asignándole influencia en el proceso a una variable que no ha cambiado, y por lo tanto la aproximación de los gradientes no es la correcta. Debido a todo lo anterior, se concluye que los estimadores de perturbación son útiles cuando la frecuencia de cambio de la perturbación es similar a la ejecución de la RTO.

Para la perturbación realizada con la función ARIMA, se obtuvo que la metodología Dual no logró llegar al óptimo del proceso cuando estas son realizadas con una frecuencia de cambio similar a la RTO. Esto se debería principalmente a que la alta tasa de cambio de las perturbaciones afectaría al cálculo de los gradientes experimentales al utilizar información de RTO pasadas que tenían un valor distinto para el flujo de A, dificultado su estimación. Cuando las perturbaciones fueron ejecutadas en una frecuencia de cambio mayor a la de la RTO, esta metodología pudo obtener valores similares al óptimo del proceso, dado que cuenta con más iteraciones en las cuales el efecto de las perturbaciones en la variable de salida es nulo, lo que implica una mejor estimación de gradientes con respecto a las variables de decisión. Al incluir los estimadores no se obtuvo una mejora considerable a ninguna frecuencia de cambio, salvo en la última (perturbación cada 6 ciclos de RTO) donde la propuesta 2 de los mínimos cuadrados (LS+COV) con errores del 12% y 0.95% para el flujo de B y temperatura respectivamente; y la propuesta 1 de Filtro

Kalman (HEKF) con errores del 13% y 0.85% para el flujo de B y temperatura respectivamente obtuvieron resultados con un porcentaje de error similar que la metodología Dual sin estimador con errores del 11% y 0.75% para el flujo de B y temperatura respectivamente.

Es por lo anterior que se concluye que los estimadores de perturbaciones sirven para perturbaciones que presentan una cierta tendencia y tasa de cambio definida, ya que ayudan en la estimación de los gradientes. También que la metodología dual con o sin estimador de perturbaciones tiene un mejor desempeño cuando las perturbaciones tienen una frecuencia de cambio superior a la ejecución de un ciclo de RTO ya que cuenta con una mayor cantidad de información de RTO pasadas con un valor fijo para la perturbación, esto permite obtener un gradiente más representativo del proceso y a su vez que la metodología converja al óptimo del proceso.

Respecto a las restricciones se tiene que según la bibliografía la RTO con MA no asegura seguir un camino factible hacia el óptimo del proceso, lo cual fue comprobado en todas las simulaciones ya que siempre se obtuvieron puntos infactibles. La inclusión de los estimadores de perturbación no mejoró este aspecto en ninguna situación, incluso en algunos casos se tiene que la cantidad de puntos infactibles aumentaría. Lo anterior se presenta con más frecuencia en las perturbaciones generadas con el modelo ARIMA, lo cual se debería a que una mayor fluctuación en el flujo de A, no permite que la RTO con MA obtenga buenos resultados en el cálculo de las variables de decisión.

Finalmente, se propone un sistema experimental escala laboratorio en base a los instrumentos disponibles en el Laboratorio de Optimización de la Universidad Técnica Federico Santa María Campus San Joaquín, el cual se ajusta a los límites operacionales de los equipos. Esto permitirá contrastar los resultados obtenidos en simulación con un sistema real, y así darle validez a los supuestos y consideraciones realizados.

9. Recomendaciones para trabajos futuros

Debido a los resultados obtenidos en los casos en que las perturbaciones son realizadas con una frecuencia mayor a la de la RTO, se recomienda utilizar un filtro que permita suavizar las estimaciones realizadas con los distintos estimadores de perturbaciones.

Para el caso de las perturbaciones con función ARIMA, se podría incluir un filtro en la estimación de los gradientes para suavizar el cambio de estos y mejorar el cálculo de los modificadores.

Dado que incluir los estimadores de perturbación aporta una mayor cantidad de información en la estimación de los gradientes, es posible que se necesite una menor excitación en el sistema para este cálculo, lo que podría beneficiar la trayectoria hacia el óptimo obteniendo una menor cantidad de puntos que infrinjan las restricciones. Por lo que se sugiere estudiar cómo afectaría a la RTO utilizar un valor menor para la restricción dual.

Ya que se pudo incluir un estimador que obtiene buenos resultados como el HEKF, se sugiere estudiar la cantidad de mediciones que permiten tener una buena aproximación en función de las mediciones que son posibles tomar e incluirlos en metodologías libres de gradientes.

10. Referencias

- Bamberger, W., & Isermann, R. (1978). Adaptive on-line steady-state optimization of slow dynamic processes. *Automatica*, 14(3), 223–230. [https://doi.org/10.1016/0005-1098\(78\)90087-0](https://doi.org/10.1016/0005-1098(78)90087-0)
- Bazaraa, M. S., Sherali, H. D., & Shetty, C. M. (1993). *Nonlinear programming : theory and algorithms*. Wiley. Retrieved from https://books.google.cl/books/about/Nonlinear_programming.html?id=_2pRAAAAMAAJ&redir_esc=y
- Biegler, L. T. (2010). *Nonlinear Programming: Concepts, Algorithms, and Applications to Chemical Processes*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM, 3600 Market Street, Floor 6, Philadelphia, PA 19104). <https://doi.org/10.1137/1.9780898719383>
- Brdyś, M. A., & Tatjewski, P. (1994). An Algorithm for Steady-State Optimizing Dual Control of Uncertain Plants. *IFAC Proceedings Volumes*, 27(11), 215–220. [https://doi.org/10.1016/S1474-6670\(17\)47650-6](https://doi.org/10.1016/S1474-6670(17)47650-6)
- Chachuat, B., Srinivasan, B., & Bonvin, D. (2009). Adaptation strategies for real-time optimization. *Computers & Chemical Engineering*, 33(10), 1557–1567. <https://doi.org/10.1016/J.COMPCHEMENG.2009.04.014>
- Colomer, J., Meléndez, J., & Ayza, J. (2000). Sistemas de supervisión : introducción a la monitorización y supervisión experta de procesos: métodos y herramientas., 83. Retrieved from [http://intranet.ceautomatica.es/sites/default/files/upload/10/files/sistemas de supervision.pdf](http://intranet.ceautomatica.es/sites/default/files/upload/10/files/sistemas%20de%20supervision.pdf)
- Cutler, C. R., & Perry, R. T. (1983). REAL TIME OPTIMIZATION WITH MULTIVARIABLE CONTROL IS REQUIRED TO MAXIMIZE PROFITS. *Computers and Chemical Engineering*, 7(5), 663–667. Retrieved from https://ac.els-cdn.com/0098135483800106/1-s2.0-0098135483800106-main.pdf?_tid=a4a005a4-646e-40c4-af31-6d2a85880b9a&acdnat=1531246819_14f0e90c7c71e7b647b35067e57ccf56
- Forbes, J. F., & Marlin, T. E. (1994). Model Accuracy for Economic Optimizing Controllers: The Bias Update Case. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 33(8), 1919–1929. <https://doi.org/10.1021/ie00032a006>
- Fuente, S. (2008). MODELO ARIMA (p , d , q) (P , D , Q) s. *Modelo ARIMA*, 100. Retrieved from <http://www.estadistica.net/ECONOMETRIA/SERIES-TEMPORALES/modelo-arima.pdf>
- Gao, W., & Engell, S. (2005). Iterative set-point optimization of batch chromatography. *Computers & Chemical Engineering*, 29(6), 1401–1409. <https://doi.org/10.1016/J.COMPCHEMENG.2005.02.035>
- Gao, W., Wenzel, S., & Engell, S. (2016). A reliable modifier-adaptation strategy for real-time optimization. *Computers & Chemical Engineering*, 91, 318–328. <https://doi.org/10.1016/J.COMPCHEMENG.2016.03.019>
- Grewal, M. S., & Andrews, A. P. (2001). *Kalman filtering : theory and practice using MATLAB®* (Second Edi). Wiley-Interscience. Retrieved from <https://la.mathworks.com/support/books/kalman-filtering-theory-and-practice-using-matlab-grewal.html>
- Huber, P. J. (1981). *Robust Statistics. Analysis* (Vol. 82). <https://doi.org/10.1002/9780470434697>
- Kalman, R. E. (1960). A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems. *Journal of Basic Engineering*, 82(1), 35. <https://doi.org/10.1115/1.3662552>
- Mansour, M., & Ellis, J. E. (2003). Comparison of methods for estimating real process derivatives in on-line optimization. *Applied Mathematical Modelling*, 27(4), 275–291. [https://doi.org/10.1016/S0307-904X\(02\)00124-5](https://doi.org/10.1016/S0307-904X(02)00124-5)
- Marchetti, A., Chachuat, B., & Bonvin, D. (2009). Modifier-Adaptation Methodology for Real-Time Optimization. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 48(13), 6022–6033. <https://doi.org/10.1021/ie801352x>

- Navia, D. (2013). *Handling uncertainties in process optimization*. Retrieved from <http://uvadoc.uva.es/handle/10324/3008>
- Navia, D., Puen, A., Quintanilla, P., Bergh, L., Briceño, L., & de Prada, C. (2018). A Proposal to Include the Information of Disturbances in Modifier Adaptation Methodology for Real Time Optimization. In *28th European Symposium on Computer Aided Process Engineering* (Vol. 43, pp. 1081–1086). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-64235-6.50189-3>
- Nicholson, B., López-Negrete, R., & Biegler, L. T. (2014). On-line state estimation of nonlinear dynamic systems with gross errors. *Computers & Chemical Engineering*, 70, 149–159. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.11.018>
- Pistikopoulos, E. N. (1995). Uncertainty in process design and operations. *Computers & Chemical Engineering*, 19(95), 553–563. [https://doi.org/10.1016/0098-1354\(95\)87094-6](https://doi.org/10.1016/0098-1354(95)87094-6)
- Roberts, P. D. (1979). An algorithm for steady-state system optimization and parameter estimation. *International Journal of Systems Science*, 10(7), 719–734. <https://doi.org/10.1080/00207727908941614>
- Rodríguez-Blanco, T., Sarabia, D., Navia, D., & de Prada, C. (2017). Efficient Nested Modifier Adaptation for RTO using Lagrangian functions. *Computer Aided Chemical Engineering*, 40(1), 1723–1728. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63965-3.50289-0>
- Schmidt, L. A. M. and. (1985). *Discovery of the Kalman Filter as a Practical Tool for Aerospace and Industry*. Retrieved from <https://ntrs.nasa.gov/archive/nasa/casi.ntrs.nasa.gov/19860003843.pdf>
- Simon, D. (2006). *Optimal state estimation : Kalman, H [infinity] and nonlinear approaches*. Wiley-Interscience.
- Sirohi, A., & Choi, K. Y. (1996). Process, 1332–1343.
- Strejc, V. (1980). Least squares parameter estimation. *Automatica*, 16(5), 535–550. [https://doi.org/10.1016/0005-1098\(80\)90077-1](https://doi.org/10.1016/0005-1098(80)90077-1)
- Tatjewski, P. (2002). ITERATIVE OPTIMIZING SET-POINT CONTROL – THE BASIC PRINCIPLE REDESIGNED. *IFAC Proceedings Volumes*, 35(1), 49–54. <https://doi.org/10.3182/20020721-6-ES-1901.00994>
- Williams, T. J., & Otto, R. E. (1960). A generalized chemical processing model for the investigation of computer control. *AIEE Transaction*, 79(5), 458–473. <https://doi.org/10.1109/TCE.1960.6367296>
- Zhang, Y., & Forbes, F. (2000). Extended design cost: A performance criterion for real-time optimization systems. *Computers and Chemical Engineering*, 24(8), 1829–1841. [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(00\)00561-5](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(00)00561-5)

11. Anexos

11.1 Anexo A

Se utiliza la función ARIMA para modelar las perturbaciones en el flujo de A. Sus siglas significan *Auto Regresive Integrated Moving Average* que deriva de sus tres componentes: AR (autorregresivo, p), I (integrado, d) y MA (medias móviles, q). La función ARIMA (p,d,q) permite describir un valor como una función lineal de los datos anteriores y errores debidos al azar, pudiendo incluir componentes cíclicos o estacionales (Fuente, 2008).

Los modelos ARIMA son la suma de 3 modelos:

- Proceso Autorregresivo AR (p):

Es posible explicar una variable por su valor en el periodo anterior más un término de error:

$$Y_t = \mu + \phi_p Y_{t-p} + a_t \quad 11.1$$

Donde y corresponde a una variable, ϕ es un coeficiente, μ es una constante y a_t corresponde al error en el tiempo t y p la cantidad de periodos pasados.

- Proceso de medias móviles MA(q)

Se puede predecir una variable a partir de los errores observados en los periodos de tiempo anteriores.

$$y_t = \mu + \theta_q a_{t-q} \quad 11.2$$

Donde y corresponde a una variable, θ es un coeficiente, μ es una constante y a_t corresponde al error en el tiempo t y q la cantidad de periodos pasados

- Proceso de Diferenciación I(d):

Para suavizar la tendencia en las curvas de las variables se utiliza una técnica de diferenciación o integración según:

$$\Delta y_t = y_t - y_{t-1} \quad 11.3$$

Se utiliza una función ARIMA (1,0,2) ya que permite crear una perturbación alrededor de un valor nominal para el flujo de A, sin una tendencia definida y con una autocorrelación de los datos.

11.2 Anexo B

Tabla 11.1. Resumen de comparación de los errores promedios en la estimación de las perturbaciones y de las variables de decisión de 3 hasta 6 ciclos

	Cada 3 Ciclos			Cada 4 Ciclos			Cada 5 Ciclos			Cada 6 Ciclos		
Metodología	$F_A\%$	$F_B\%$	$T_R\%$	$F_A\%$	$F_B\%$	$T_R\%$	$F_A\%$	$F_B\%$	$T_R\%$	$F_A\%$	$F_B\%$	$T_R\%$
SE	-	9,26	0,75	-	6,46	0,52	-	7,31	0,61	-	4,78	0,41
HEKF	5,30	12,02	1,11	2,98	9,91	0,87	4,65	6,49	0,44	4,53	7,74	0,68
SSKF	13,57	11,82	0,63	16,02	15,42	1,34	10,95	7,56	0,56	16,35	15,26	1,35
LS	15,02	16,13	1,68	15,61	19,99	1,94	15,17	14,61	1,37	14,81	18,88	2,03
LS+COV	23,48	11,59	0,83	23,94	8,88	0,70	23,18	7,39	0,56	20,11	10,68	0,61
FAIR	16,26	19,86	1,95	15,63	15,79	1,54	15,24	13,37	1,33	15,03	21,45	1,88

11.3 Anexo C

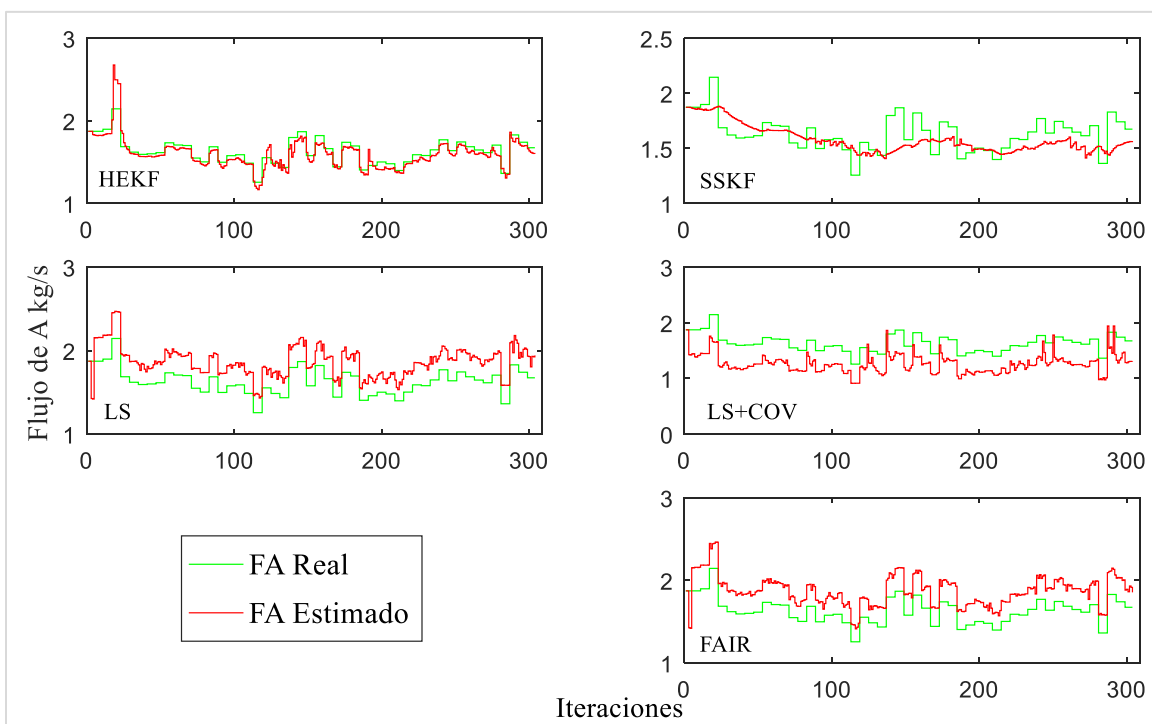


Figura 11.1. Comparación de del valor estimado para F_A obtenida con los distintos estimadores de perturbaciones con perturbaciones cada 6 ciclos de RTO para la realización 2.

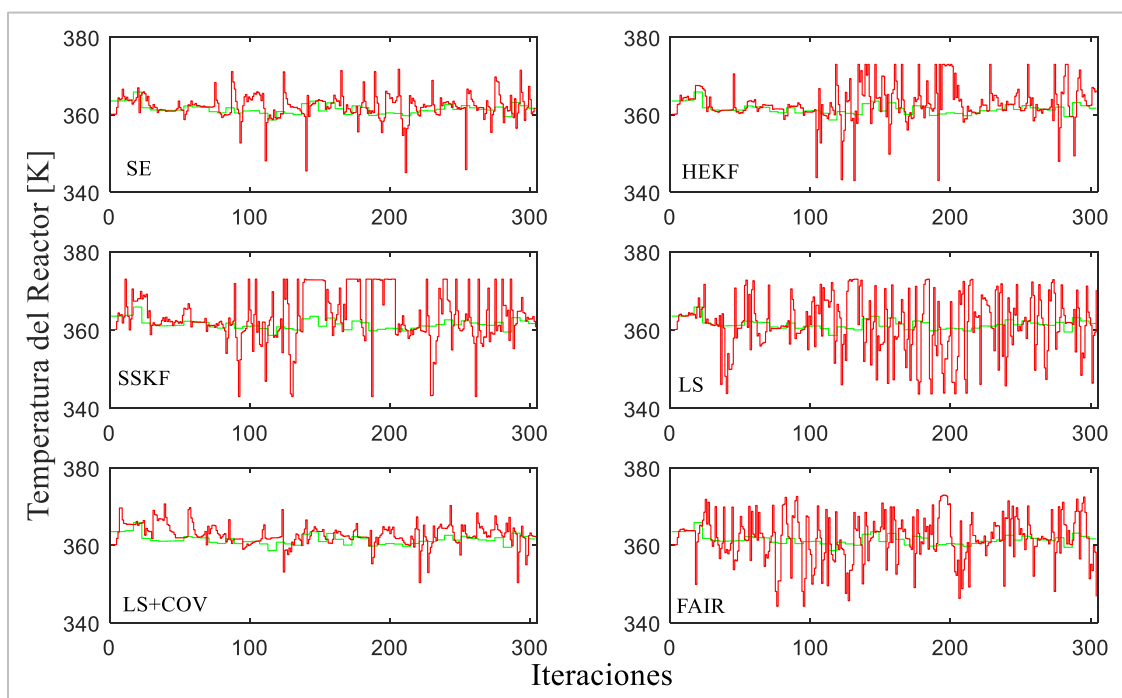


Figura 11.2. Comparación de la variable de decisión 2 (temperatura del Reactor) obtenida al incluir las distintas metodologías de estimación de perturbaciones incluidas cada 6 ciclos de RTO para la realización 2-

11.4 Anexo D

Tabla 11.2. Valores escalados para el flujo de A y flujo de B

F_A	$F_B(u_1)$	F_A Escalado	$F_B(u_1)$ Escalado
2,25	6,00	0,0054	0,0146
2,15	5,85	0,0049	0,0132
2,06	5,58	0,0044	0,0118
1,97	5,30	0,0039	0,0105
1,87	5,03	0,0035	0,0094
1,78	4,76	0,0031	0,0083
1,69	4,49	0,0028	0,0074
1,59	4,24	0,0025	0,0067
1,50	4,02	0,0022	0,0060
1,40	3,79	0,0020	0,0054
1,31	3,55	0,0018	0,0048
1,22	3,32	0,0016	0,0044
1,12	3,09	0,0014	0,0039
1,03	3,00	0,0013	0,00372

11.5 Anexo E

La implementación y simulación del Reactor de Otto Williams, el algoritmo de RTO con Adaptación de Modificadores Dual y los estimadores de perturbación se programan en MatLab®. Las características del sistema computacional utilizado se resumen en la siguiente tabla:

Tabla 11.3. Resumen de las características del sistema computacional utilizado.

Marca	Gear
Modelo	SLIM-103i
Procesador	Intel® Core i7-7700 3.6 GHz
Cantidad de Núcleos	4
Cantidad de subprocesos	8
Memoria RAM	8GB DDR4
Sistema operativo	Windows 10
Placa Madre	Asus® M/B Intel® H110M-R A/L/V (1151)