

Detección y localización de fallas mediante el uso de observadores no lineales para procesos de copolimerización en emulsión

Fault detection and isolation using nonlinear observers for emulsion copolymerization processes

Adriana del Carmen Téllez- Anguiano¹, Carlos Manuel Astorga-Zaragoza¹, Juan Reyes-Reyes¹, Alberto Álvarez-Castillo², Manuel Adam-Medina^{1}*

¹Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico, (CENIDET). Interior Internado Palmira s/n Col. Palmira C. P. 62490 Cuernavaca, Morelos, México

²División de Posgrado e Investigación y Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica. Instituto Tecnológico de Zacatepec. Calz. Tecnológico N.º 27. C.P. 62780. Zacatepec, Morelos, México

(Recibido el 1 de Septiembre de 2008. Aceptado el 26 de marzo de 2009)

Resumen

En este trabajo se presenta el diseño e implementación de un sistema de detección y localización de fallas para un proceso de copolimerización en emulsión. El enfoque propuesto para el diseño de los generadores de residuos está basado en técnicas de desacoplo usando geometría diferencial y el uso de observadores no lineales de alta ganancia, en el cual cada uno de los residuos se encuentra dedicado a la detección y a la localización de una falla en particular. Las fallas consideradas en este trabajo son de tipo aditivo, presentes en los actuadores del proceso, que representan un mal funcionamiento de las bombas de alimentación de flujo de monómeros hacia el interior del reactor. Una de las principales ventajas del método propuesto son los observadores utilizados como generadores de residuos, los cuales son fáciles de implementar y de sencilla calibración, lo que favorece su aplicación en línea. La eficacia del método se valida en simulación para el caso de un proceso de copolimerización en emulsión entre el acrilato de butilo y el estireno.

-----*Palabras clave:* Detección y localización de fallas (FDI), observador de alta ganancia, sistemas no lineales, proceso de copolimerización.

* Autor de correspondencia: teléfono: + 52 +777 + 151 48 64, fax: +52 + 777 + 252 28 51, correo electrónico: adam@cenidet.edu.mx (M. A. Medina).

Abstract

In this work the design and implementation of a fault detection and isolation system for a process of copolymerization in emulsion are presented. The proposed approach used to design the residual generators is based on decoupling techniques using differential geometry and high gain nonlinear observers; every residue is dedicated to the detection and the location of a particular fault. The faults considered in this work are additive, presented in the actuators of the process and they represent a malfunction in the feeding flow pumps of the monomer towards the interior of the reactor. The observers used to generate residuals are one of the main advantages of the proposed method, these are easy to implement and have a simple calibration, which make their on-line application suitable. The effectiveness of this method was validated by simulation for the process of copolymerization in emulsion between butyl acrylate and styrene.

----- **Keywords:** Fault detection and isolation, high gain observer, nonlinear systems, copolymerization process.

Introducción

Los procesos industriales, en particular los procesos químicos, son día a día más sofisticados y con mayores necesidades de seguridad y fiabilidad, requiriendo acciones de inspección, vigilancia y supervisión eficientes. Por consecuencia, dichos procesos exigen el desarrollo de métodos en línea de automatización y de detección y localización de fallas, que no afecten su eficiencia en materia de producción y de seguridad. Sin embargo, la naturaleza no lineal y el acoplamiento de los procesos químicos hacen muy difícil esta tarea. Un caso típico de sistema no lineal complejo lo constituyen los reactores de copolimerización. Éstos representan un reto importante en el desarrollo de técnicas modernas de detección y localización de fallas (FDI por las siglas en inglés de *Fault Detection and Isolation*). La copolimerización en emulsión es un proceso que requiere de un amplio conocimiento de las dinámicas que intervienen en el proceso, así como de ciertos procedimientos específicos para lograr la obtención de polímeros de calidad. Las condiciones bajo las cuales se lleva a cabo la copolimerización tienen un gran efecto sobre la longitud de la cadena polimérica, el grado de ramificación, la distribución en la composición y la secuencia del copolímero, el peso molecular y otras características de las

estructuras moleculares que afectan directamente las propiedades finales del copolímero producido. A pesar de que intervienen un gran número de variables en el proceso, una de las pocas variables manipulables que tienen influencia directa en la calidad del producto final son los flujos de alimentación de los monómeros al proceso. Estos flujos determinan las concentraciones en el reactor y son los que dan las propiedades más importantes a la macromolécula [1]. Si el flujo de alimentación se altera debido a la presencia de fallas en los dispositivos encargados de alimentarlo, puede ocurrir que la composición del copolímero se altere de manera no deseada, afectando todas sus propiedades químicas y físicas. Desde hace varios años, la detección y localización de fallas de procesos se realiza principalmente en el dominio de los sistemas lineales. Algunas publicaciones recientes que utilizan este enfoque son los trabajos [2-4]. Sin embargo un gran número de procesos industriales de la industria química son de naturaleza no lineal, como es el caso del reactor de copolimerización en emulsión [5].

Entre las técnicas dedicadas al diagnóstico para sistemas no lineales (SNL), cabe destacar los trabajos que utilizan técnicas de desacoplo de las fallas con el uso de métodos geométricos [6] propuestos por Hammouri [7] y De Persis [8],

los cuales proporcionan condiciones necesarias y suficientes para la detección y aislamiento de fallas basándose en la teoría de distribuciones de observabilidad. El trabajo presentado en [9] se enfoca a una clase particular de sistemas bilineales, en el marco del diagnóstico por desacoplamiento exacto de las fallas. Alcorta y Frank [10] proponen métodos analíticos de detección de fallas utilizando observadores no lineales. La contribución principal de este trabajo es proponer el diseño de un sistema de detección y localización de fallas (FDI) en un reactor de copolimerización en emulsión entre el estireno y el acrilato de butilo en modo de operación semi-continuo. El enfoque utilizado se basa en los trabajos teóricos propuestos en [7] para el diseño de sistemas de generación de residuos desacoplados mediante el uso de observadores no lineales. El objetivo del sistema diseñado es detectar y localizar las fallas que se presentan en los actuadores encargados de la alimentación de monómeros hacia el interior del reactor.

Modelo matemático

En esta sección, se describe de manera simplificada el modelo matemático utilizado para el diseño del sistema de detección de fallas para un reactor de copolimerización por emulsión (Figura 1). Este modelo ha sido utilizado exitosamente por varios autores, por ejemplo, en [11] utilizan este modelo para desarrollar un controlador que realice el seguimiento de la temperatura de transición vítrea de un copolímero; Sheibat-Othman y Othman [12] lo utilizan para el diseño de una ley de control que regula la composición del polímero y la concentración del monómero en las partículas de polímeros; en la referencia [13] se diseña un observador no lineal adaptativo para la estimación de un parámetro asociado con el número promedio de radicales presentes en las partículas del polímero. Si se desea profundizar sobre el modelado de reactores de copolimerización, se puede consultar el trabajo presentado en la referencia [5].

El modelo matemático a utilizar consiste en las tres siguientes ecuaciones diferenciales (consul-

tar la nomenclatura para obtener la descripción de las variables y constantes utilizadas en esta sección). Éstas representan el comportamiento dinámico de un reactor de copolimerización en emulsión de tipo continuamente agitado. Este tipo de reacción es exotérmica, sin embargo, debido a que el objetivo del trabajo es presentar un sistema de detección de fallas y no el control, se establece como hipótesis que el proceso es isotérmico, es decir, existe un lazo de control externo que regula la temperatura de la chaqueta del reactor mediante la manipulación del flujo del líquido de enfriamiento (Figura 1).

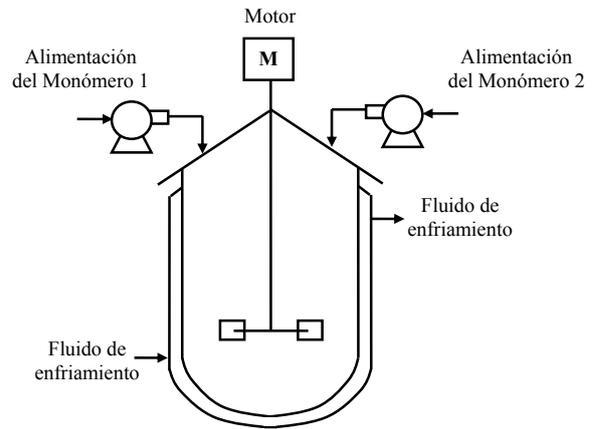


Figura 1 Reactor de copolimerización

$$\begin{aligned} \dot{N}_1(t) &= Q_1(t) - \vartheta(t) [M_1^p](t) R_{p1}(t) V_e(t) \\ \dot{N}_2(t) &= Q_2(t) - \vartheta(t) [M_2^p](t) R_{p2}(t) V_e(t) \\ \dot{V}_e(t) &= \frac{MW_1}{\rho_1} Q_1(t) + \frac{MW_2}{\rho_2} Q_2(t) + \varepsilon \end{aligned} \quad (1)$$

$\dot{N}_1(t)$ y $\dot{N}_2(t)$ se derivan del balance de materia en un reactor semi-continuo donde el primer término representa el flujo de alimentación del monómero en cuestión $Q_i(t)$, mientras que el segundo término representa la tasa de consumo del monómero en cuestión. Este segundo término está compuesto por:

- (i) El parámetro agrupado, presentado en la Ec. (2).

$$\vartheta(t) = \frac{\bar{n}(t)N_p(t)}{N_A} \quad (2)$$

el cual es directamente proporcional al número promedio de radicales presentes en las partículas del polímero \bar{n} y el número total de partículas por litro de emulsión $N_p(t)$, e inversamente proporcional al número de Avogadro N_A .

(ii) La concentración de cada uno de los monómeros en las partículas, mostrada en la Ec. (3).

$$[M_i^p](t) = \left\{ \begin{array}{l} \frac{(1-\phi^{star})N_i(t)}{\Delta_1(t)} \quad \text{para } V_d(t) > 0 \\ \frac{N_i(t)\phi^{star}}{\Delta_2(t)} \quad \text{para } V_d(t) = 0 \end{array} \right\} \quad (3)$$

La primera condición ($V_d > 0$) se aplica durante el intervalo de flotamiento en la cual una fase separada de monómero está presente en el reactor (V_d se refiere al volumen de esta fase separada). Tan pronto desaparece esta fase, entonces se utiliza la segunda condición de la ecuación anterior. Las variables Δ_i ($i = 1, 2$) se utilizan para representar las expresiones dadas en las Ecs. (4) y (5).

$$\Delta_1(t) = \frac{MW_1}{\rho_1} N_1(t) + \frac{MW_2}{\rho_2} N_2(t) \quad (4)$$

$$\Delta_2(t) = \frac{MW_1}{\rho_{1,homo}} (N_1^{tot}(t) - N_1(t)) + \frac{MW_2}{\rho_{2,homo}} (N_2^{tot}(t) - N_2(t)) \quad (5)$$

El volumen total de las gotas de monómero $V_d(t)$ está dado por la Ec. (6).

$$V_d(t) = \alpha N_1(t) + \beta N_2(t) + \gamma(t) \quad (6)$$

donde las variables α , β y γ se utilizan para simplificar las expresiones descritas en las Ecs. (7), (8) y (9), las cuales se presentan a continuación.

$$\alpha = \left(\frac{MW_1}{\rho_1} + \frac{(1-\phi^{star})MW_1}{\phi^{star}\rho_{1,homo}} \right) \quad (7)$$

$$\beta = \left(\frac{MW_2}{\rho_2} + \frac{(1-\phi^{star})MW_2}{\phi^{star}\rho_{2,homo}} \right) \quad (8)$$

$$\gamma = \frac{(1-\phi^{star})}{\phi^{star}} \left[\frac{MW_1}{\rho_{1,homo}} N_1^{tot} + \frac{MW_2}{\rho_{2,homo}} N_2^{tot} \right] \quad (9)$$

El número total de moles del monómero i , $N_i^{tot}(t)$, se calcula integrando el valor del flujo de alimentación de cada uno de éstos, como se muestra en la Ec. (10).

$$N_i^{tot}(t) = \int_0^t Q_i(t) dt + N_i^{tot}(0) \quad (10)$$

(iii) El término R_{pi} se define en la Ec. (11) como:

$$R_{pi} = \left[\frac{k_{pii}N_i(t)}{N_i(t) + (k_{ij}/k_{ji})N_j(t)} + \frac{k_{pji}N_j(t)}{N_j(t) + (k_{ji}/k_{ij})N_i(t)} \right] \quad (11)$$

(iv) Finalmente, el volumen del contenido del reactor V_c cuyo valor instantáneo se calcula a partir de la tercera ecuación diferencial del sistema representado por las Ecs. (1).

La ecuación diferencial del volumen considera de manera implícita que la densidad del copolímero es simplemente una combinación lineal de las densidades de los dos homopolímeros originados por los monómeros usados en su producción. De manera estricta, esta consideración es incorrecta y por esta razón, se incluye el término \mathcal{E} que representa las incertidumbres de modelado en esta ecuación.

Otra variable de interés es el volumen del copolímero generado, V_c , el cual se define como:

$$V_c = MW_1 \left[\frac{N_1^{tot} - N_1}{\rho_{1,homo}} \right] + MW_2 \left[\frac{N_2^{tot} - N_2}{\rho_{2,homo}} \right]$$

Para realizar el diagnóstico de fallas en el reactor, es necesario contar con mediciones periódicas de ciertas variables que permitan determinar en principio la posible presencia de una falla. En el caso del reactor de copolimerización, las salidas medibles son la siguientes: la cantidad total de energía liberada por la reacción $y_1(t)$ y la conversión de masa global $y_2(t)$. Estas salidas pueden expresarse matemáticamente a través de las Ecs. (12) y (13) de la siguiente manera:

$$y_1 = \Delta H_1 N_1^{tot} \left(1 - \frac{N_1}{N_1^{tot}} \right) + \Delta H_2 N_2^{tot} \left(1 - \frac{N_2}{N_2^{tot}} \right) \quad (12)$$

$$y_2 = \frac{MW_1 (N_1^{tot} - N_1) + MW_2 (N_2^{tot} - N_2)}{MW_1 N_1^{tot} + MW_2 N_2^{tot}} \quad (13)$$

Modelo del sistema con fallas

En este trabajo se desarrolla un sistema de detección de fallas en la alimentación de los monómeros. Las fallas que pueden presentarse pueden ser debidas a fallas en las bombas de alimentación de monómeros o fugas en los conductos de alimentación (Figura 1). En cualquiera de los dos casos anteriormente mencionados, la falla puede ser representada como una desviación en el flujo de alimentación representada como funciones escalares aditivas a las señales de flujo de alimentación. En otras palabras, los flujos de alimentación $Q_1(t)$ y $Q_2(t)$ deben ser reemplazados en el modelo dado por la Ec. (1) por

$$Q_1(t) + \Delta Q_1(t) \quad \text{y} \quad Q_2(t) + \Delta Q_2(t)$$

respectivamente. De esta manera, el modelo matemático del reactor de copolimerización en emulsión, considerando posibles fallas en los flujos de alimentación, queda representado por la Ec. (14) de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \dot{N}_1(t) &= Q_1(t) + \Delta Q_1(t) - \vartheta(t) [M_1^p](t) R_{p1}(t) V_e(t) \\ \dot{N}_2(t) &= Q_2(t) + \Delta Q_2(t) - \vartheta(t) [M_2^p](t) R_{p2}(t) V_e(t) \\ \dot{V}_e(t) &= \frac{MW_1}{\rho_1} [Q_1(t) + \Delta Q_1(t)] + \frac{MW_2}{\rho_2} [Q_2(t) + \Delta Q_2(t)] + \varepsilon \end{aligned} \quad (14)$$

Las siguientes simulaciones permiten visualizar de manera cuantitativa el efecto de una falla en el proceso. Los monómeros considerados son el *acrilato de butilo* (monómero 1) y el *estireno* (monómero 2), denominados en lo sucesivo como BuA y Sty respectivamente por sus acrónimos en inglés. Los parámetros y constantes utilizados en estas simulaciones se proporcionan en la Tabla 1. El modelo matemático del reactor dado por la Ec. (14) se implementó en MATLAB®. La integración de las ecuaciones diferenciales se llevó a cabo utilizando el método de Euler simple con un período de integración de 6 s.

Tabla 1 Valores utilizados en la simulación del modelo matemático

Parámetro	Valor
k_{p11} (cc/mol s)	$4,5 \times 10^5$
k_{p12} (cc/mol s)	$2,24 \times 10^6$
k_{p21} (cc/mol s)	$3,20 \times 10^5$
k_{p22} (cc/mol s)	$2,40 \times 10^5$
MW_1 (g/mol)	128,2
MW_2 (g/mol)	104,15
\bar{n}	0,5
N_A (mol)	$6,022 \times 10^{23}$
N_p (L ⁻¹)	$1,8 \times 10^{14}$
\bar{n}^{star}	0,4
ρ_1 (g/cm ³)	0,89
ρ_2 (g/cm ³)	0,90
$\rho_{1,homo}$ (g/cm ³)	1,08
$\rho_{2,homo}$ (g/cm ³)	1,05
ϑ (num. part / L)	$\bar{n} N_p / N_a$

En lo sucesivo, se describen los resultados de simulación considerando dos casos: el caso 1 contempla la ausencia de fallas en el proceso, mientras que el caso 2 considera que existe una falla en la etapa de alimentación del reactor.

Caso 1. Simulación del reactor libre de fallas

El modelo se simuló considerando las siguientes condiciones iniciales de operación del reactor: temperatura de la chaqueta de enfriamiento del reactor constante, alimentación inicial de monómeros en el reactor $N_1(0)=2,9$ mol y $N_2(0)=3,6$ mol, volumen inicial de emulsión en el reactor $V_e(0)=3775,65$ ml. El modo de operación del reactor se lleva a cabo en modo semi-continuo, existiendo alimentación de Sty hacia el interior del reactor de manera intermitente, tal como se muestra en la Figura 2. El volumen del contenido del reactor V_e aumenta cada que existe alimentación de Sty, como se aprecia en la parte inferior de esta figura.

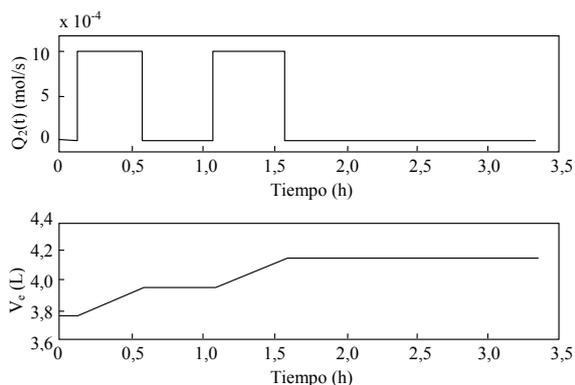


Figura 2 Alimentación de Sty $Q_2(t)$ y Volumen de emulsión, V_e , respectivamente

En la parte superior de la Figura 3 se muestra la evolución de las concentraciones de los monómeros. Se aprecia que los monómeros desaparecen a medida que se forma el copolímero, lo cual se muestra en la parte inferior de dicha figura.

Caso 2. Simulación del reactor con fallas

La falla a considerar es una fuga de monómero en el conducto de alimentación. Esta fuga se presenta durante la segunda inyección de monómero hacia el reactor. Esto implica, que la cantidad de monómero alimentada es menor a la que debería ingresar al reactor. En la Figura 4 se representa gráficamente la falla en el flujo de alimentación de Sty, representada como ΔQ_2 . Como se puede apreciar, la falla es muy pequeña. Ésta correspon-

de al 5% de pérdida del total de flujo de alimentación.

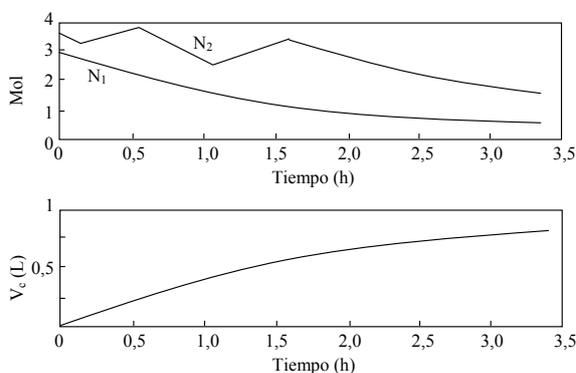


Figura 3 Evolución de los monómeros BuA (N_1) y Sty (N_2), y evolución del volumen del copolímero, V_e , respectivamente

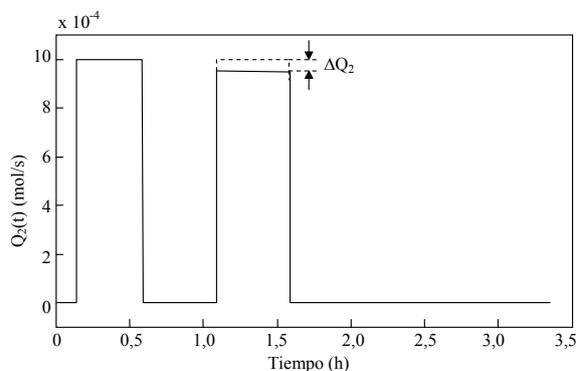


Figura 4 Presencia de una falla ΔQ_2 en la alimentación de Sty

En la Figura 5 se aprecia el efecto de la falla en el flujo de alimentación de Sty sobre la concentración del monómero al interior del reactor (línea sólida N_2). Para efectos comparativos, también se grafica la concentración de Sty cuando no existe falla en la alimentación de Sty (línea punteada N_2). La falla presente también afecta la concentración de BuA, pero ésta no se refleja de manera significativa en la evolución de esta variable. Es evidente que una falla de pequeñas dimensiones (como la simulada en este caso) ocasiona efectos proporcionales a éstas. Así, una falla de esta magnitud puede pasar fácilmente desapercibida, pudiendo tener como consecuencia, que el producto

final del proceso de copolimerización no cumpla con las propiedades físicas esperadas.

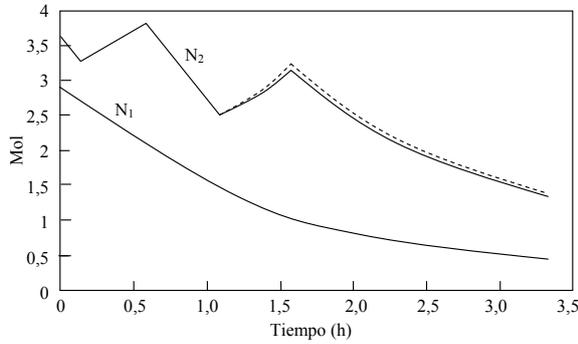


Figura 5 Consecuencias de la falla ΔQ_2 en la concentración de Sty (línea sólida N_1) Concentración de Sty sin falla en la alimentación (línea punteada N_2)

Planteamiento del problema

La motivación de este trabajo es presentar un sistema de detección de fallas que genere una señal de alerta en presencia de un mal funcionamiento en el sistema de alimentación de monómeros en un reactor de copolimerización en emulsión. Existen diversos trabajos sobre detección de fallas en procesos. Sin embargo, como se mencionó anteriormente, el interés de este trabajo es utilizar la teoría presentada en los trabajos de [7] quienes proponen una solución al llamado *problema fundamental de generación de residuos* para sistemas no lineales (abreviado como FPRG por las siglas en inglés de Fundamental Problem of Residual Generation) basada en el diseño de observadores no lineales para la generación de señales de alerta en presencia de fallas. A continuación se proporciona una breve descripción del planteamiento del FPRG.

Se considera que se tiene un sistema no lineal sujeto a fallas, como el presentado en la Ec. (15).

$$\dot{x} = f(x) + \sum_{i=1}^m g_i(x)u_i + \sum_{i=1}^{n_f} e_i(x)\xi_i \quad (15)$$

$$y = h(x)$$

donde $x \in \mathfrak{R}^n$ es el vector de variables de estado, $u \in \mathfrak{R}^m$ es el vector de entradas del sis-

tema, $y \in \mathfrak{R}^p$ es el vector de salidas del sistema. Las funciones $f(x) \in \mathfrak{R}^n$, $g_i(x) \in \mathfrak{R}^n$, $e_j(x) \in \mathfrak{R}^n$, $h(x) \in \mathfrak{R}^p$ son campos vectoriales continuamente diferenciables.

ξ_i ($i=1 \dots n_f$) representa funciones escalares desconocidas, variantes en el tiempo, que representan las principales fallas que se presentan en el sistema. Esto significa que cuando la falla i está presente en el sistema, la función ξ_i es no nula, pero su evolución en el tiempo es desconocida. En caso contrario, cuando no existe la falla i , la función ξ_i es cero.

El objetivo del FPRG es diseñar un conjunto de sistemas dinámicos, denominados generadores de residuos, de tal forma que cada uno de ellos se encuentre dedicado a la detección y aislamiento de una falla en particular ξ_i . Cada uno de los generadores de residuos está dado por el sistema dinámico de la Ec. (16):

$$\dot{z} = F(z, y) + \sum_{i=1}^m G_i(z, y)u_i \quad (16)$$

$$r_i = H(z, y)$$

donde r_i son los residuos, z es el vector de variables de estado del generador de residuos, u , y son los vectores de entrada y salida del sistema dinámico dado en la Ec. (16) respectivamente; F , G son campos vectoriales continuamente diferenciables y H es una función escalar de variable vectorial.

Los generadores de residuos deben cumplir con las siguientes características:

a) El residuo $r_i(t)$ es no nulo si la señal ξ_i es también no nula. $r_i(t)$ es cero si el vector ξ_i es también cero, en este caso se dice que la señal $r_i(t)$ detecta la falla ξ_i .

b) El residuo $r_i(t)$ es cero si y sólo si la señal ξ_i es cero, aún cuando las señales ξ_j ($j=1, \dots, i-1, i+1, \dots, n_f$) sean no nulas. En este caso se dice que la señal $r_i(t)$ aísla (o localiza) la falla ξ_i de las otras fallas ξ_j ($j=1, \dots, i-1, i+1, \dots, n_f$).

El diseño de un generador de residuos asociado a la i -ésima falla en el proceso se da en dos etapas. La primera etapa consiste en encontrar una transformación de coordenadas $z=\Phi(x)$ y una función de salida \bar{y} . La transformación de coordenadas debe satisfacer ciertas condiciones definidas [14], las cuales se muestran a continuación para este caso particular:

1. $\frac{\partial \phi}{\partial x} e_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, n_f, j \neq i$
2. $\frac{\partial \phi}{\partial x} e_i(x) \neq 0$

Si tal transformación existe, el sistema dado por la Ec. (15) es transformado en un sistema dinámico como el representado en la Ec. (17)

$$\dot{z} = F(z, y) + \sum_{i=1}^m G_i(z, y)u_i + E_i(z, \eta)\xi_i \quad (17)$$

$$\bar{y} = z_1 = Cz$$

donde las funciones $F(z,y)$, $G_i(z,y)$ y $E_i(z,\eta)$ se calculan con base en las Ecs. (18), (19) y (20) de la siguiente manera:

$$F(z, y) = \frac{\partial \phi}{\partial x} f(x) \quad (18)$$

$$G_i(z, y) = \frac{\partial \phi}{\partial x} g_i(x), \quad i = 1, \dots, m \quad (19)$$

$$E_i(z, \eta) = \frac{\partial \phi}{\partial x} e_i(x), \quad i = 1, \dots, n_f \quad (20)$$

$$\begin{pmatrix} \dot{N}_1 \\ \dot{N}_2 \\ \dot{V}_e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\vartheta(t)[M_1^p]R_{p1}V_e \\ -\vartheta(t)[M_2^p]R_{p2}V_e \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{MW_1}{\rho_1} \end{pmatrix} Q_1 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{MW_2}{\rho_2} \end{pmatrix} Q_2 + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{MW_1}{\rho_1} \end{pmatrix} \Delta Q_1 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{MW_2}{\rho_2} \end{pmatrix} \Delta Q_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \varepsilon \end{pmatrix} \quad (23)$$

En esta representación, se aprecia que el modelo matemático del reactor es un sistema no li-

La segunda etapa del diseño del generador de residuos consiste en generar la señal de residuo r , mediante el uso de un observador. Para diseñar el observador, se debe considerar el sistema transformado dado por la Ec. (21) en ausencia de fallas, es decir, considerando $\xi_i=0$:

$$\dot{z} = F(z, y) + \sum_{i=1}^m G_i(z, y)u_i \quad (21)$$

$$\bar{y} = z_1 = Cz$$

donde $C=[1 \ 0 \ \dots \ 0]$. En [7] se demuestra que este sistema es observable y se propone utilizar un observador de alta ganancia para la generación de los residuos r descrito por la Ec. (22) como:

$$\dot{\hat{z}} = F(\hat{z}, y) + \sum_{i=1}^m G_i(\hat{z}, y)u_i - \rho S_\theta^{-1} C^T (C\hat{z} - \bar{y}) \quad (22)$$

$$r = C\hat{z} - \bar{y}$$

donde el término ρS_θ^{-1} es la ganancia del observador. Los detalles sobre el análisis de convergencia de los observadores de alta ganancia, así como de las propiedades geométricas del generador de residuos pueden ser consultados en [7].

Detección y localización de fallas en un reactor de copolimerización

En esta sección se utilizarán las herramientas para la detección y localización de fallas, descritas en la sección anterior, pero aplicadas al reactor de copolimerización cuyo modelo matemático está dado por las Ecs. (14).

Dicho modelo puede ser reescrito como se muestra en la Ec. (23).

neal afín a las entradas, con la estructura dada por la Ec. (15), donde x es el vector de estados $x = [x_1, x_2, x_3]^T = [N_1, N_2, V_e]^T$,

$$f(x) = \begin{pmatrix} -\vartheta(t) [M_1^p] R_{p1} V_e \\ -\vartheta(t) [M_2^p] R_{p2} V \\ 0 \end{pmatrix}, \quad g_1(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{MW_1}{\rho_1} \end{pmatrix}$$

$$g_2(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{MW_2}{\rho_2} \end{pmatrix}$$

$$e_1(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{MW_1}{\rho_1} \end{pmatrix}, \quad e_2(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{MW_2}{\rho_2} \end{pmatrix}$$

A continuación se muestra el diseño de los generadores de residuos para la detección y localización de las fallas ΔQ_1 y ΔQ_2 .

Detección y localización de las fallas ΔQ_1 y ΔQ_2 .

Para la detección y localización de la falla ΔQ_1 , considere la siguiente transformación de coordenadas $z_1 = \Phi_1(x) = -N_1$. Es fácil verificar que esta transformación cumple con las condiciones requeridas:

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial x} e_2(x) = 0, \quad \frac{\partial \phi_1}{\partial x} e_1(x) \neq 0$$

La salida del proceso elegida para detectar la falla ΔQ_1 es $y_1 = z_1 = -N_1$. Esta salida implica que se debe conocer la cantidad del monómero 1 (N_1) en la mezcla dentro del reactor. En la práctica, esta variable no es medible de manera directa, pero puede ser calculada a partir de las mediciones disponibles del sistema: $y_1(t)$, $y_2(t)$ dadas por las Ecs. (12)-(13). La expresión que permite calcular N_1 a partir de estas mediciones se presenta en la Ec. (24):

$$N_1 = N_1^{tot} + \frac{\Delta H_2 y_2 - \omega_2 y_1}{\omega_2 \Delta H_1 - \omega_1 \Delta H_2} \quad (24)$$

donde ω_i ($i=1,2$) es definido en la Ec. (25) como:

$$\omega_i = \frac{MW_i}{MW_1 N_1^{tot} + MW_2 N_2^{tot}}, \quad i=1,2 \quad (25)$$

Para la detección y localización de la falla ΔQ_2 , considere la siguiente transformación de coordenadas $z_2 = \Phi_2(x) = -N_2$. Esta transformación también cumple con las condiciones requeridas:

$$\frac{\partial \theta_2}{\partial x} e_1(x) = 0, \quad \frac{\partial \theta_2}{\partial x} e_2(x) \neq 0$$

La salida del proceso elegida para detectar la falla ΔQ_2 es la cantidad del monómero 2 (N_2) en la mezcla dentro del reactor $y_2 = z_2 = -N_2$. En la práctica, esta variable tampoco es medible de manera directa. La expresión que permite calcular N_2 a partir de las mediciones disponibles se presenta en la Ec. (26), que se muestra a continuación:

$$N_2 = N_2^{tot} + \frac{\Delta H_1 y_2 - \omega_1 y_1}{\omega_1 \Delta H_2 - \omega_2 \Delta H_1} \quad (26)$$

Considerando lo anterior, se tienen los sistemas transformados presentado en las Ecs. (27) y (28):

$$\begin{aligned} \dot{z}_1 &= \vartheta [M_1^p](z_1, z_2) R_{p1}(z_1, z_2) y_3 - Q_1 - \Delta Q_1 \\ \bar{y}_1 &= z_1 \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \dot{z}_2 &= \vartheta [M_2^p](z_1, z_2) R_{p2}(z_1, z_2) y_3 - Q_2 - \Delta Q_2 \\ \bar{y}_2 &= z_2 \end{aligned} \quad (28)$$

donde $[M_i^p](z_1, z_2)$, $R_{pi}(z_1, z_2)$, ($i=1,2$) se obtienen reemplazando $N_1 = -z_1$ y $N_2 = -z_2$ en las Ecs. (3) y (11) respectivamente. Finalmente, los generadores de residuos (observadores) están dados por los siguientes sistemas:

Para la detección y localización de la falla ΔQ_j :

$$\begin{aligned} \dot{\hat{z}}_1 &= \vartheta [M_1^p](\hat{z}_1, \hat{z}_2) R_{p1}(\hat{z}_1, \hat{z}_2) y_3 - Q_1 - \theta_1 (\hat{z}_1 - \hat{y}_1) \\ r_1 &= \hat{z}_1 - \bar{y}_1 \end{aligned} \quad (29)$$

Para la detección y localización de la falla ΔQ_2 :

$$\begin{aligned} \dot{\hat{z}}_2 &= \vartheta [M_2^p](\hat{z}_1, \hat{z}_2) R_{p2}(\hat{z}_1, \hat{z}_2) y_3 - Q_2 - \theta_2 (\hat{z}_2 - \hat{y}_2) \\ r_2 &= \hat{z}_2 - \bar{y}_2 \end{aligned} \quad (30)$$

Resultados de simulación

Con el fin de verificar la efectividad de los generadores de residuos para la detección y localización de fallas en las bombas de alimentación de monómero, se llevó a cabo la siguiente simulación numérica implementada en MATLAB®. El modelo del reactor se simuló considerando las mismas condiciones iniciales de operación del reactor utilizadas en las pruebas de simulación del modelo matemático (ver la Sección 2), es decir, una alimentación inicial de monómeros depositados en el reactor $N_1(0)=2,9$ mol y $N_2(0)=3,6$ mol y volumen inicial de emulsión en el reactor $V_g(0)=3775,65$ ml. El modo de operación del reactor se lleva a cabo en modo semi-continuo.

Para efectos de simulación, en este trabajo se considera que el reactor opera de la siguiente manera. El reactor no debe recibir alimentación del monómero 1 (BuA); éste se deposita desde el inicio al interior del reactor. Para simular una falla en la bomba de alimentación del monómero 1 (ver la Figura 1), se supone que la falla en la bomba genera una fuga de monómero que se alimenta al reactor a partir del instante $t=5$ h y de una magnitud razonablemente pequeña de $\Delta Q_1=5*10^{-5}$ mol/s (ver la gráfica superior de la Figura 6). En un experimento real, esta falla puede deberse a que el elemento de control que manipula la apertura o cierre de la bomba de alimentación se encuentra descalibrado. Otra interpretación física es que, si en lugar de tratarse de una bomba de alimentación, fuera una válvula (neumática, eléctrica, etc.), la falla podría deberse a que el asiento de la válvula se encuentra dañado, permitiendo el flujo de monómero al interior del reactor.

Por otra parte, en condiciones normales de operación, se deben alimentar cuatro inyecciones del monómero 2 (Sty), cada inyección con una du-

ración de 30 min, y de magnitud de $Q_2=10*10^{-4}$ mol/s en los instantes de tiempo mostrados en la gráfica inferior de la Figura 6. Para simular la existencia de fallas en la bomba de alimentación del monómero 2, se suponen dos casos:

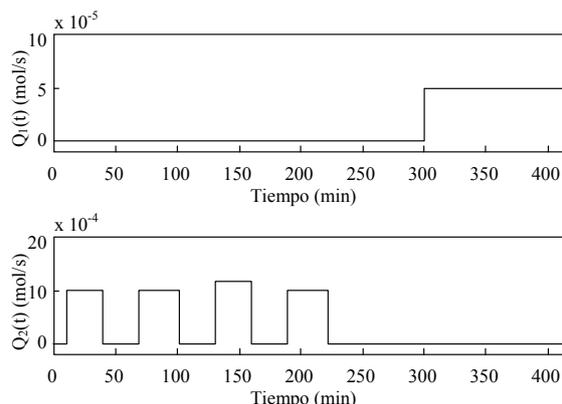


Figura 6 Flujos de alimentación de BuA y de Sty ($Q_1(t)$ y $Q_2(t)$ respectivamente)

El primer caso consiste en alimentar 10% más monómero que en la operación normal (tercera inyección de monómero en la gráfica inferior de la Figura 6). En un experimento real, esta falla puede deberse que el elemento de control que manipula la apertura o cierre de la bomba de alimentación se encuentra descalibrado,

El segundo caso consiste en alimentar 5% menos monómero que en la operación normal (cuarta inyección de monómero en la gráfica inferior de la Figura 6). En un experimento real, esta falla puede deberse a que existe una fuga de monómero en el conducto de salida de la bomba y parte del monómero no llega a ser alimentado al interior del reactor.

Los resultados obtenidos se ilustran en las dos gráficas mostradas en la figura 7. En la gráfica superior se muestra la evolución del residuo r_1 (generado por el observador de la Ec. (29)), mientras que en la gráfica inferior se muestra la evolución en el tiempo del residuo r_2 (generado por el observador de la Ec. (30)).

Como era de esperarse, dado que no existe falla en las bombas de alimentación antes de los primeros 130 min de la simulación, los dos residuos

(r_1, r_2) se mantienen en cero durante este período. A partir del minuto 130, ocurre la primera falla en la bomba de alimentación del monómero 2 (Sty). Se observa que a partir de este instante el residuo r_2 difiere de cero (indicando con esto la presencia de la falla ΔQ_2) mientras el residuo r_1 se mantiene nulo. Una vez que la falla desaparece (en el minuto 160), el residuo r_2 regresa a cero. En el minuto 190, la variación de residuo r_2 a un valor distinto de cero indica nuevamente la existencia de una falla ΔQ_2 en la bomba de alimentación del monómero 2 (Sty) y, una vez que la falla desaparece, el residuo r_2 regresa a su valor nulo. Finalmente, en el minuto 300 ocurre la falla en la bomba de alimentación del monómero 1 (Abu), ocasionando que el residuo r_1 sea no nulo (observe que r_2 se mantiene en cero), indicando con esto la presencia de la falla ΔQ_1 .

Es importante observar en ambas gráficas de la Figura 7 que una falla en la bomba de alimentación del monómero 1 (ABu) no afecta la evolución del residuo r_2 y viceversa, una falla en la bomba de alimentación del monómero 2 (Sty) no afecta la evolución del residuo r_1 , demostrando con esto que los residuos son generados por sistemas desacoplados permitiendo la localización de la falla.

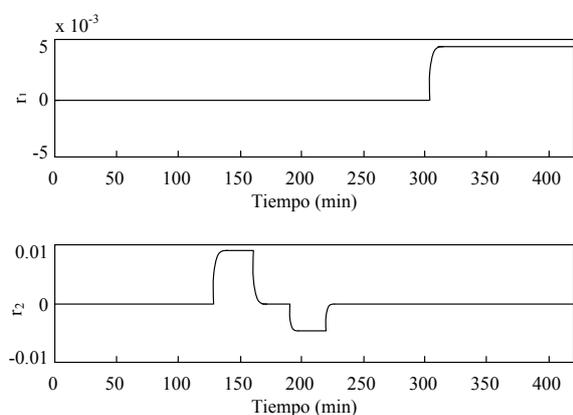


Figura 7 Evolución durante la simulación de los residuos r_1 y r_2

Conclusiones

En este trabajo se presenta una propuesta de solución al problema de la detección y localización

de fallas en los actuadores de un reactor de copolimerización en emulsión. El método está basado en el diseño de generadores de residuos desacoplados (enfoque geométrico) mediante observadores de alta ganancia para una clase especial de sistemas no lineales afines al control (clase a la cual pertenece el modelo matemático del reactor de copolimerización).

Para llevar a cabo este diseño, se utiliza un modelo matemático aproximado del proceso de copolimerización (redundancia analítica). Los resultados obtenidos en las simulaciones permiten concluir que el método propuesto puede ser utilizado para la concepción de un sistema de ayuda al operador para la detección de malos funcionamientos en las bombas de alimentación de monómeros hacia el interior del reactor.

Una de las principales ventajas del método propuesto es que los observadores utilizados como generadores de residuos son fáciles de implementar (siempre y cuando se cuente con un modelo matemático apropiado) y su calibración es sencilla (debido a la presencia de un sólo parámetro de sintonización en cada uno de éstos). Por otra parte, el esfuerzo de cómputo requerido es muy bajo y por consiguiente puede ser llevado fácilmente a una aplicación real en línea en trabajos posteriores.

Agradecimientos

Se agradece el patrocinio del PROMEP por la beca académica otorgada a la M. C. Adriana del Carmen Téllez Anguiano para la realización de su tesis doctoral iniciada en enero de 2007 en el CENIDET.

Nomenclatura

M_i^p	Concentración del monómero i en las partículas	mol L^{-1}
\bar{n}	Número promedio de radicales por partícula	$[\text{num.prom.rad.}] \text{ part}^{-1}$
N_i	Número de moles del monómero i	Mol

N_p	Número total de partículas por litro de la emulsión	[num.part] L ⁻¹
N_A	Número de Avogadro	Mol
N_i^{tot}	Número total de moles del monómero i adicionado al reactor	Mol
Q_i	Razón del flujo de alimentación del monómero i	Mol s ⁻¹
$R_{pi}R_{pi}$	Velocidad total de polimerización del monómero i	Mol s ⁻¹ L ⁻¹
V_d	Volumen total de las gotas del monómero	L
V_e	Volumen total de la emulsión	L
Φ, ϕ	Transformación de coordenadas	
ϕ^{star}	Fracción volumétrica de los monómeros en las partículas hinchadas bajo saturación	
k_{pij}	Coefficiente de velocidad de propagación de la cadena en crecimiento del tipo i con el monómero del tipo j	L mol ⁻¹ s ⁻¹
MW_i	Peso molecular del monómero i	g mol ⁻¹

Referencias

1. R. G. Gilbert. *Emulsion polymerization*. Academic Press. London. 1995. pp 1-22.
2. K. Zhang, B. Jiang, V. Cocquemot. "Adaptive observer-based fast fault estimation". *International Journal of Control, Automation and Systems*. Vol. 6. 2008. pp. 320-326.
3. C. Edwards, C. P. Tan. "Sensor fault tolerant control using sliding mode observers". *Control Engineering Practice*. Vol. 14. 2006. pp. 897-908.
4. M. Rodrigues, D. Theilliol, M. Adam-Medina, D. Sauter. "A fault detection and isolation scheme for industrial systems based on multiple operating models". *Control Engineering Practice*. Vol. 16. 2008. pp. 225-239.
5. E. Ginsburger, F. Pla, C. Fonteix, S. Hoppe, S. Massebeuf, P. Hobbes, P. Swaels. "Modelling and simulation of batch and semi-batch emulsion copolymerization of styrene and butyl acrylate". *Chemical Engineering Science*. Vol. 58. 2003. pp. 4493-4514.
6. A. Isidori, C. Krener, C. Gori-Giorgi, S. Monaco. "A geometric approach to synthesis of failure detection filters". *IEEE Transaction on automatic Control*. Vol. 26. 1981. pp. 331-345.
7. H. Hammouri, M. Kinnaert, E. H. El-Yaagoubi. "Observer-based approach to fault detection and isolation for nonlinear systems". *IEEE Transactions on Automatic Control*. Vol. 44. 1999. pp. 1879-1884.
8. C. De Persis, A. Isidori. "A geometric approach to nonlinear fault detection and isolation". *IEEE Transactions on Automatic Control*. Vol. 46. 2001. pp. 853-865.
9. M. Kinnaert. "Fault diagnosis based on analytical models for linear and nonlinear systems: a tutorial". *5º IFAC Symposium on Fault Detection Supervision and Safety for Technical Processes SAFEPROCESS*. Washington DC. USA. 2003. pp. 37-50.
10. E. A. García, P. Frank. "Deterministic nonlinear observer-based approaches to fault diagnosis". *Control Engineering Practice*. Vol. 5. 1997. pp. 683-692.
11. G. Févotte, T. F. McKenna, S. Othman, S. Hammouri. "Non-linear tracking of glass transition temperatures for free radical emulsion copolymers". *Chemical Engineering Science*. Vol. 53. 1998. pp. 773-786.
12. N. Sheibat-Othman, S. Othman. "Control of an emulsion polymerization reactor". *Ind. Eng. Chem. Res*. Vol. 45. 2006. pp. 206-211.
13. S. Espinoza-Salgado, J. Reyes-Reyes, A. Alvarez-Castillo, C. M. Astorga-Zaragoza, E. Mendizábal-Mijares, G. Cadenas-Pliego. "Observador no lineal adaptativo de alta ganancia para procesos de copolimerización en emulsión." *Revista Mexicana de Ingeniería Química*. Vol. 7. 2008. pp. 89-98.
14. R. Seliger, P. M. Frank. "Fault-Diagnosis by Disturbance Decoupled Nonlinear Observers". *Proceedings of the 30th Conference on Decision and Control*. New York. 1991. pp. 2248-2253.