

ESTADO DEL ARTE SOBRE LAS HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES
PARA EL MODELAMIENTO MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN DINÁMICA DE
REACTORES QUÍMICOS DE PREPOLIMERIZACIÓN

YECID IGNACIO REYES BAENA
HARRY WILLIAM PEARSON ARRIETA

DIRECTOR
ÓSCAR SEGUNDO ACUÑA CAMACHO

MINOR EN AUTOMATIZACIÓN INDUSTRIAL
UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE BOLÍVAR
PROGRAMA DE INGENIERÍA ELÉCTRICA Y ELECTRÓNICA
CARTAGENA DE INDIAS D. T. Y C.

2005.

ESTADO DEL ARTE SOBRE LAS HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES PARA
EL MODELAMIENTO MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN DINÁMICA DE
REACTORES QUÍMICOS DE PREPOLIMERIZACIÓN

YECID IGNACIO REYES BAENA
HARRY WILLIAM PEARSON ARRIETA

**Trabajo de monografía presentado como requisito para obtener el certificado
del minor en Automatización Industrial**

DIRECTOR
ÓSCAR SEGUNDO ACUÑA CAMACHO
ESP. AUTOMATIZACIÓN INDUSTRIAL

MINOR EN AUTOMATIZACIÓN INDUSTRIAL
UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE BOLÍVAR
PROGRAMA DE INGENIERÍA ELÉCTRICA Y ELECTRÓNICA
CARTAGENA DE INDIAS D. T. Y C.

2005.

Nota de aceptación

Jurado

Jurado

Cartagena D. T. Y C., Octubre de 2005

Señores

COMITÉ CURRICULAR

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE BOLÍVAR

La ciudad

Respetados señores:

Con toda atención nos dirigimos a ustedes con el fin de presentarles a su consideración, estudio y aprobación la monografía titulada ESTADO DEL ARTE SOBRE LAS HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES PARA EL MODELAMIENTO MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN DINÁMICA DE REACTORES QUÍMICOS DE PREPOLIMERIZACIÓN como requisito parcial para optar al título de ingeniero electricista.

Atentamente

YECID IGNACIO REYES BAENA.

Cartagena D. T. Y C., Octubre de 2005

Señores

COMITÉ CURRICULAR

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE BOLÍVAR

La ciudad

Respetados señores:

Con toda atención nos dirigimos a ustedes con el fin de presentarles a su consideración, estudio y aprobación la monografía titulada ESTADO DEL ARTE SOBRE LAS HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES PARA EL MODELAMIENTO MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN DINÁMICA DE REACTORES QUÍMICOS DE PREPOLIMERIZACIÓN como requisito parcial para optar al título de ingeniero electricista.

Atentamente

HARRY WILLIAM PEARSON ARRIETA

Cartagena D. T. Y C., Octubre de 2005

Señores

COMITÉ CURRICULAR

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE BOLÍVAR

La ciudad

Cordial saludo:

A través de la presente me permito entregar la monografía titulada ESTADO DEL ARTE SOBRE LAS HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES PARA EL MODELAMIENTO MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN DINÁMICA DE REACTORES QUÍMICOS DE PREPOLIMERIZACIÓN para su estudio y evaluación la cual fue realizada por los estudiantes YECID IGNACIO REYES BAENA y HARRY WILLIAM PEARSON ARRIETA, bajo mi dirección.

Atentamente,

ÓSCAR SEGUNDO ACUÑA CAMACHO
ESP. AUTOMATIZACIÓN INDUSTRIAL

AUTORIZACIÓN

Yo, YECID IGNACIO REYES BAENA, identificado con la cédula de ciudadanía número 73.205.258 de Cartagena, autorizo a la Universidad Tecnológica de Bolívar, para hacer uso de mi trabajo de monografía y publicarlo en el catálogo online de la biblioteca.

YECID IGNACIO REYES BAENA

AUTORIZACIÓN

Yo, HARRY WILLIAM PEARSON ARRIETA, identificado con la cédula de ciudadanía número 9.149.474 de Cartagena, autorizo a la Universidad Tecnológica de Bolívar, para hacer uso de mi trabajo de monografía y publicarlo en el catálogo online de la biblioteca.

HARRY WILLIAM PEARSON ARRIETA

TABLA DE CONTENIDO

1. INTRODUCCIÓN	- 1 -
2. DESCRIPCIÓN GENERAL DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DEL POLIESTIRENO.	- 3 -
2.1. GENERALIDADES	- 3 -
2.2. INFORMACIÓN GENERAL DEL PROCESO	- 4 -
2.3. REACTOR TANQUE AGITADO – CSTR	- 11 -
3. PERSPECTIVA ACTUAL SOBRE LAS HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES PARA EL MODELAMIENTO MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN DINÁMICA	- 13 -
4. EXPOSICIÓN SOBRE LAS TÉCNICAS MÁS USADAS EN EL MODELAMIENTO Y SIMULACION DE PROCESOS QUÍMICOS.	- 24 -
4.1. CLASIFICACIÓN DE LOS MÉTODOS DE SIMULACIÓN	- 24 -
4.1.1. Simulación cualitativa y cuantitativa.	- 25 -
4.1.1.1. Simulación estacionaria y dinámica.	- 26 -
4.1.1.2 Simulación determinística y estocástica	- 27 -
4.2. IDENTIFICACION DE SISTEMAS	- 31 -
4.2.1 Modelos de sistemas dinámicos.	- 33 -
4.2.2. Modelo de entrada-salida.	- 35 -
4.2.3. Modelos paramétricos lineales.	- 36 -
4.2.4. Modelos paramétricos no-lineales.	- 37 -
4.2.4.1. Modelos paramétricos No-lineales: Series y Modelos	- 38 -
4.2.5. Modelos No paramétricos, Redes Neuronales.	- 42 -
4.2.5.1. Redes Feedforward	- 42 -
4.2.5.2. Redes recurrentes	- 45 -
4.2.5.3. Aspectos Algorítmicos	- 45 -
4.2.5.4. Identificación con redes neuronales	- 46 -
4.2.6. Identificación en Bucle Cerrado.	- 51 -
4.3. ESTIMACIÓN DE ESTADOS	- 55 -
4.3.1. Modelos en el espacio de estados.	- 55 -
4.3.2. La estimación lineal en sistemas dinámicos – El filtro de Kalman.	- 56 -
4.3.3. El caso no lineal: Filtros No-lineales.	- 58 -
4.3.4. Filtro extendido de Kalman (EKF) y Filtro No-Lineal de Segundo Orden (SNF).	- 60 -
4.3.5. Filtro extendido iterado de Kalman (IEKF).	- 61 -
4.4. VALIDACIÓN DE MODELOS	- 63 -
4.4.1. Control adaptativo.	- 65 -
5. EXPOSICIÓN SOBRE LAS TÉCNICAS MÁS USADAS EN EL MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS CON REACTORES TANQUE AGITADO	- 68 -
6. CONCLUSIONES	- 87 -

7. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS _____ - 89 -

8. GLOSARIO _____ - 94 -

TABLA DE FIGURAS

FIGURA 1. DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE POLIESTIRENO.	- 5 -
FIGURA 2. IMAGEN COMPUTARIZADA DE UNA CADENA MOLECULAR DE ESTIRENO.	- 7 -
FIGURA 3. PRODUCTOS TÍPICOS QUE SON ELABORADOS A PARTIR DEL POLIESTIRENO-	7
-	
FIGURA 4. DIAGRAMA DE FLUJO TÍPICO PARA EL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE POLIESTIRENO.	- 9 -
FIGURA 5. FOTOGRAFÍA DE UN REACTOR TANQUE AGITADO UTILIZADO EN LABORATORIO.	- 12 -
FIGURA 6. COMPONENTES BÁSICOS DE UN CSTR	- 12 -
FIGURA 7. RED FEEDFORWARD CON UNA CAPA OCULTA Y UNA SALIDA.	- 43 -
FIGURA 8. RED FEEDFORWARD CON DOS CAPAS OCULTAS.	- 44 -
FIGURA 9. RED RECURRENTE. Q-1 RETARDA LA SEÑAL UN TIEMPO DE MUESTREO	- 45 -
FIGURA 10. IDENTIFICACIÓN SERIE – PARALELO	- 46 -
FIGURA 11. IDENTIFICACIÓN PARALELA.	- 47 -
FIGURA 12. RED CON REALIMENTACIÓN DE LA CAPA OCULTA.	- 49 -
FIGURA 13. RED CON REALIMENTACIÓN DE LA CAPA DE SALIDA.	- 50 -
FIGURA 14. SISTEMA EN BUCLE CERRADO	- 52 -
FIGURA 15. DIAGRAMA DE FLUJO DEL FILTRO DE KALMAN	- 59 -
FIGURA 16. SISTEMA ADAPTATIVO CON IDENTIFICACIÓN DE MODELOS (MIAS)	- 66 -
FIGURA 17. SISTEMA ADAPTATIVO CON MODELO DE REFERENCIA (MRAS)	- 66 -
FIGURA 18. INTENCIÓN DE COMPLEMENTAR LOS MODELOS.	- 69 -
FIGURA 19. CONFIGURACIÓN PARA UN CSTR. TRC, LRC Y FRC SON CONTROLADORES DE TEMPERATURA, NIVEL Y FLUJO, RESPECTIVAMENTE.	- 71 -
FIGURA 20. ESQUEMA DE CONTROL EN CASCADA PARA UN CSTR.	- 72 -
FIGURA 21. RESPUESTA DE TEMPERATURA DEL MODELO DEL REACTOR EN LAZO CERRADO	- 72 -
FIGURA 22. EL PROCESO DE POLIMERIZACIÓN: 2 ENTRADAS (U,V), 2 SALIDAS (ÍNDICE DE MEZCLADO Y CANTIDAD DE PRODUCCIÓN)	- 75 -
FIGURA 23. DIAGRAMA ESQUEMÁTICO SIMPLIFICADO DEL PROCESO HYPOL PARA LA POLIMERIZACIÓN DEL POLIPROPILENO.	- 78 -
FIGURA 24. SISTEMA DE CONTROL EN PLANTA PARA UN CSTR.	- 81 -
FIGURA 25. SIMULACIÓN DEL MODELO USANDO EXCEL	- 82 -
FIGURA 26. SIMULACIÓN UTILIZANDO MÉTODOS ANALÍTICOS	- 84 -
FIGURA 27. RESULTADO DE LA SIMULACIÓN UTILIZANDO EXCEL	- 84 -
FIGURA 28. RESULTADO UTILIZANDO FORTRAN CON MÉTODOS NUMÉRICOS.	- 84 -
FIGURA 29. VARIABLES UTILIZADAS EN EL CONTROL DE PROCESOS PARA UN CSTR	-86-

1. INTRODUCCIÓN

Modelar un sistema o un proceso significa estar un paso adelante a la hora de tomar decisiones. En las aplicaciones industriales, conocer de antemano el comportamiento dinámico de un sistema o proceso nos permite determinar parámetros óptimos de las variables de proceso que inciden en la calidad del producto en fabricación. Las principales ventajas que se obtienen con las simulaciones de procesos es la creación de un ambiente similar al real con condiciones aproximadas y estimar el comportamiento de un proceso en forma dinámica. No se puede discutir el uso de herramientas matemáticas avanzadas para el modelamiento y simulación de procesos dinámicos. En el mundo de la ingeniería y control de procesos las matemáticas constituyen el motor del ingenio humano, es el idioma para comunicar ideas. Debido a esto, el conocimiento de estas herramientas no debería ser algo desconocido para cualquier ingeniero que trabaje en el campo de la automatización industrial. Todo este conocimiento permite desarrollar modelos reales que se puedan implementar en la realidad. Con el modelamiento y la simulación dinámica de un proceso químico, por ejemplo, polimerización del estireno, una empresa puede innovar con nuevos productos bajo el concepto de investigación y optimización, revirtiéndose en disminución de costos, poco desgaste del capital humano y el desarrollo del proceso pueda ser llevado a cabo en menos tiempo. Estas son algunas de las ventajas que se tienen con las simulaciones de procesos

y que permite tener un valor agregado en el producto terminado empezando por una mayor credibilidad, la cual está respaldada por la calidad de los productos que desarrolla y promete al mercado. Todo esto sirve como preámbulo para definir el objetivo de esta monografía: Dar a conocer cuales son las técnicas más apropiadas en el modelamiento matemático y la simulación dinámica de procesos químicos, entre ellos, la polimerización del estireno, teniendo en cuenta el estado del arte y el avance que estas demuestran.

La importancia de esta investigación está en recopilar la suficiente información sobre el estado del arte, en el campo de las ciencias computacionales y procesos automatizados, sobre el modelamiento matemático y simulación dinámica de reactores químicos de prepolimerización. La fuerte dependencia tecnológica que presenta esta rama de la industria química en nuestro país es una problemática que perjudica la calidad de los productos, para los cuales se necesita un modelamiento que permita establecer factores de seguridad, tiempos de respuesta, criterios de estabilidad y otros parámetros. Tal tema es de carácter estratégico para nuestro país como punta de lanza para competir con productos de óptima calidad ante un futuro mercado global. Esta investigación brindará material confiable a la Universidad Tecnológica de Bolívar para que esta ofrezca soporte para consultoría del sector químico industrial de la ciudad.

2. DESCRIPCIÓN GENERAL DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DEL POLIESTIRENO.

2.1. GENERALIDADES

El poliestireno es un material termoplástico incoloro y transparente producido de brea de carbón y gas petróleo¹. Tiene una elevada fuerza de tensión, buenas propiedades dieléctricas y elásticas. El poliestireno, según las características de los catalizadores que intervienen en el proceso presentará propiedades que permiten clasificarlo de la siguiente manera:

- El poliestireno cristal posee alta transparencia, muy buenas propiedades dieléctricas y presenta superficie brillante.
- El poliestireno de alto impacto posee alta resistencia mecánica, buenas propiedades elásticas y resistencia al ataque químico de las grasas.

Este polímero es muy resistente a químicos inorgánicos, incluso a la acción de ácidos fuertes, pero no lo es para muchos solventes orgánicos. Actualmente es

¹ Tomado de la pagina “Proyecto preliminares para plantas industriales”.Planta de producción de Poliestireno.
<http://turnkey.taiwantrade.com.tw/catlist.asp?mainid=c07&catname=PRODUCTOS+QUIMICOS&fdname=CHEMICAL+PRODUCTS>

soluble en hidrocarburos aromáticos y purificados. Este es muy resistente al agua, tiene una excelente estabilidad dimensional y propiedades dieléctricas sobresalientes. También puede ser teñido para darle un mejor atractivo fuera de afectar su transparencia. El poliestireno ablandado sobre un rango de temperatura considerable, es un material ideal para producir un moldeado por inyección. Durante el proceso de producción del poliestireno se da la unión repetida de diversas moléculas de estireno monómero, en una reacción de polimerización, formando la macromolécula de poliestireno en reactores a baja presión. La formación de polímero aumenta con la temperatura y es una reacción exotérmica (desprende calor).

2.2. INFORMACIÓN GENERAL DEL PROCESO

El proceso que se lleva a cabo para la producción del poliestireno se observa a grandes rasgos en la figura 1². El estireno monómero y los aditivos químicos son alimentados continuamente a un tanque de polimerización con un agitador donde los procesos de prepolimerización y la polimerización son iniciados, hasta que aproximadamente el 90% del compuesto es convertido en solución. La solución, que contiene el polímero, es bombeada hacia un desvolatizador, donde los residuos del estireno monómero que no reaccionaron son vaporizados, condensados y reciclados continuamente tras la primera etapa de polimerización.

² Ibid 1.

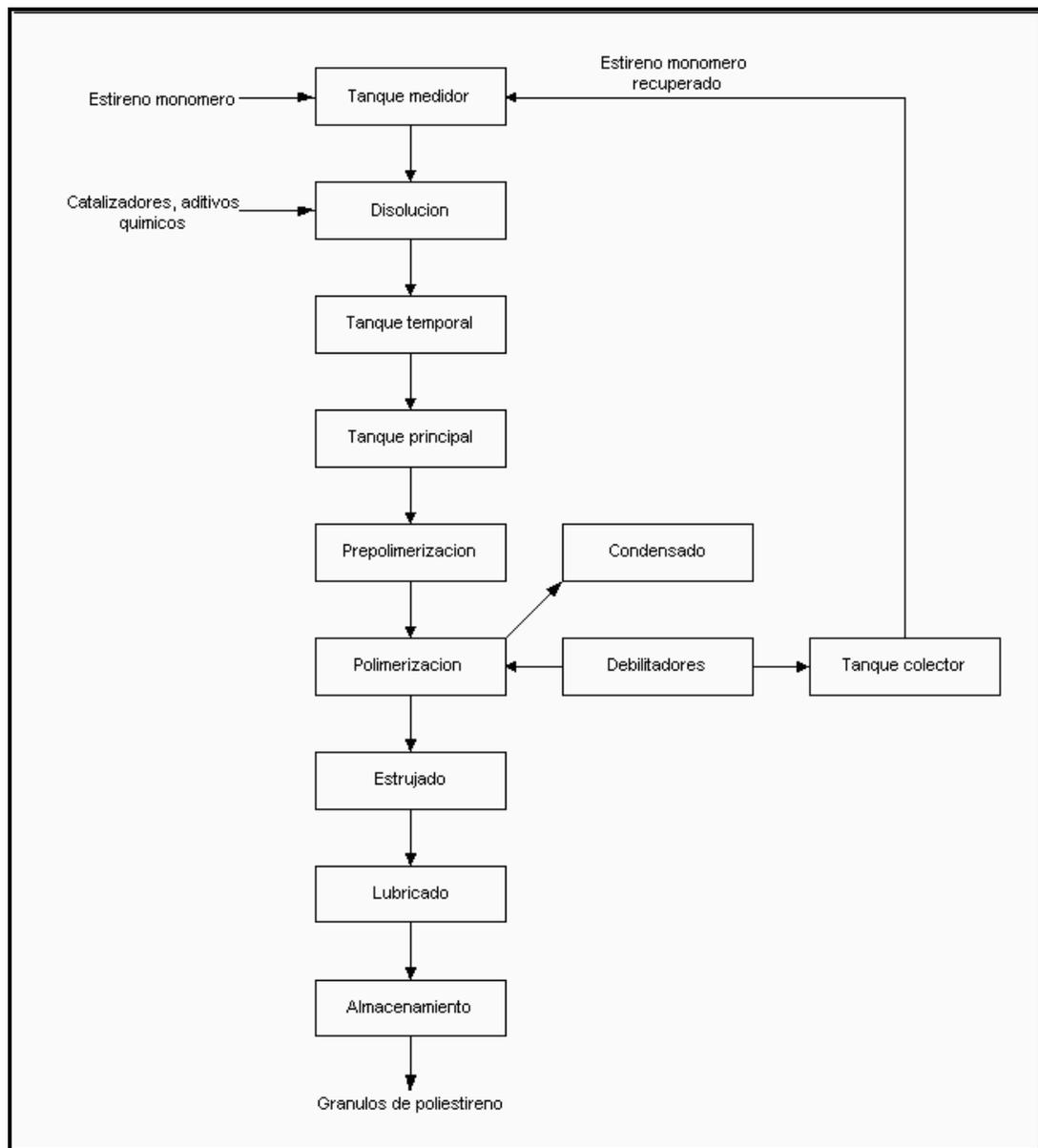


Figura 1. Diagrama de flujo del proceso de producción de poliestireno.

El poliestireno fundido fluye del alimentador de plataforma cónica del desvolatizador dentro de un moldeador que moldea, refrigera, seca y filtra el poliestireno en forma de píldoras o comprimidos. Luego, los comprimidos de poliestireno son transportados a los depósitos de almacenamiento.

Fundamentalmente, la reacción que se lleva a cabo en estos reactores es conocida en el ambiente de la química como “catálisis homogénea”³. La catálisis es una habilidad de las sustancias para exaltar, por mero contacto, la afinidad latente de los reactivos para producir una reacción, que de otra forma no tendría lugar (Jakob Berzelius - 1835). La importancia de la catálisis estriba en que la mayor parte de los productos químicos de gran consumo (*commodities*), obtenidos industrialmente, se sintetizan por medio de procesos catalíticos. Igualmente, los productos de alto valor añadido (*fine chemicals*), suelen sintetizarse mediante catálisis, reduciendo el costo de producción, mejorando la selectividad y reduciendo los residuos finales.

El catalizador es una sustancia que aumenta la velocidad con la que una reacción alcanza el equilibrio, sin consumirse esencialmente en esta reacción (Wilhem Ostwald – 1895). Además, el catalizador activa las moléculas y las sensibiliza frente al ataque de reactivos favoreciendo la interacción entre ellos. Para que el costo de un catalizador sea aceptable hay que tener en cuenta su durabilidad y el valor del producto que se obtiene con él. Muchos catalizadores homogéneos se basan en metales preciosos o escasos, lo que influye a la hora de su utilización práctica. En las figuras 2 y 3 se aprecian respectivamente una imagen computarizada de una cadena molecular de estireno en tres dimensiones y los productos finales que son elaborados a partir del poliestireno.

³ Tomado de la presentación “Catálisis homogénea aplicada”. Universidad de Castilla La Mancha UCLM. Fernando Carrillo Hermosilla. Área de Química Inorgánica.
<http://www.uclm.es/profesorado/fcarrillo/TEMASCATALISIS/INTRODUCCION.ppt>

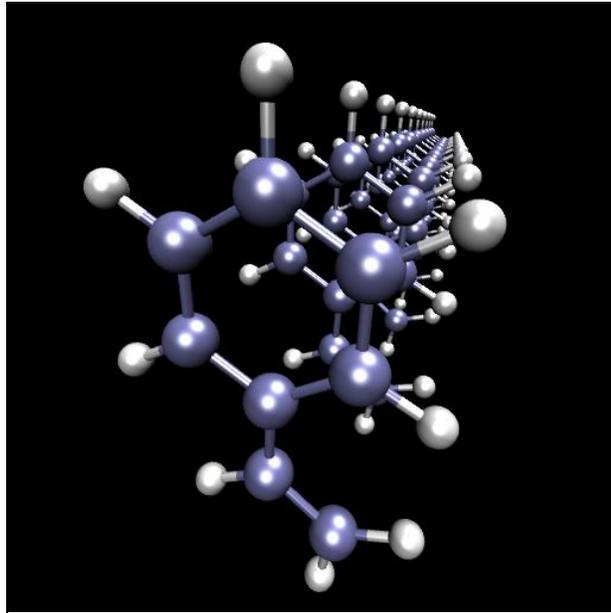


Figura 2. Imagen Computarizada de una cadena molecular de estireno⁴.



Figura 3. Productos típicos que son elaborados a partir del poliestireno⁵

⁴ Tomada de la pagina <http://nanostructures.phys.polymtl.ca/galerie.html>

⁵ Tomada de la pagina <http://www.plasticos.com.mx/poliestireno.html>

Entre los factores de ingeniería que se consideran para un proceso catalítico homogéneo están⁶:

- ✚ Diseño del reactor.
- ✚ Condiciones de Operación.
- ✚ Separación y Recuperación del catalizador.
- ✚ Reutilización del catalizador.

Las denominaciones de los reactores utilizados para catálisis homogéneas son: tipo tanque agitado (*CSTR*⁷) y reactor tubular. Sin embargo, es importante conocer que existen otros tipos de reactores en el medio industrial utilizados para catálisis heterogéneas y otros tipos de procesos (Ej.: tipo flujo pistón). En la tabla 1⁸ se resumen algunas de las características más importantes de estos reactores.

Tipo de Reactor	Propiedades	Modo de operación
Reactor Tanque Agitado	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Buena mezcla de componentes. ✓ Eficiente dispersión de gases. ✓ Transferencia de calor uniforme 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Batch. ✓ Semibatch. ✓ Continuo.
Reactor Tubular	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Uso continuo. ✓ Evita reacciones laterales del producto ✓ Evita desactivación del catalizador por el producto. 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Lecho Fijo. ✓ Lecho fluidizado. ✓ De membrana

Tabla 1. Principales características de los reactores utilizados para catálisis homogénea.

⁶ Ibid 3.

⁷ CSTR: *Continuous Stirred Tank Reactor*

⁸ Tomada de la presentación “Catálisis homogénea aplicada”, Op.cit.

Existen diversas tecnologías que se emplean en este tipo de proceso, de acuerdo a la configuración de los reactores y al principio de funcionamiento de estos⁹. Existen configuraciones que constan de un tren de tres reactores en serie, el primero de ellos un reactor de tipo CSTR y los otros dos son reactores de flujo pistón. En la figura 4 se muestra un diagrama de flujo para una configuración típica de un tren de reactores en serie junto con los otros equipos que intervienen en el proceso. En el medio industrial de polimerización del estireno, al primer reactor se le denomina prepolimerizador. En otras tecnologías se tiene una configuración con número y tipo de reactores diferentes. Por ejemplo es común que se tenga una batería de varios reactores en serie de tipo flujo pistón. En esta configuración el reactor denominado prepolimerizador (el primero) es de tipo flujo pistón.

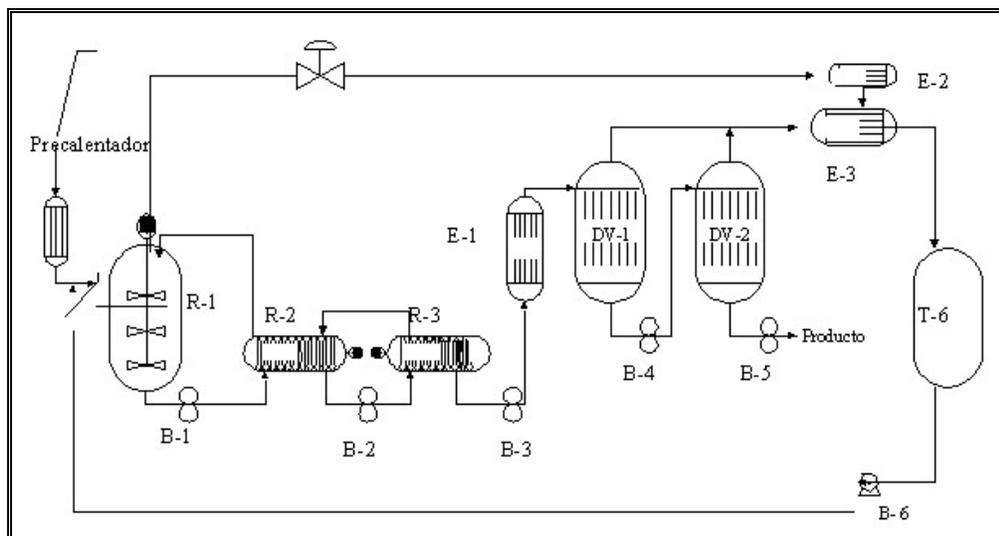


Figura 4. Diagrama de flujo típico para el proceso de producción de poliestireno.

⁹ Tomado del documento titulado “Modelación matemática y simulación dinámica del proceso de prepolimerización de estireno”. Darío Gutiérrez, Oscar S. Acuña, Dr. José L. Villa. Universidad Autónoma de Bucaramanga. 2005. Pág. 4

Al reactor entra en forma constante la alimentación. Esta alimentación es la mezcla de carga preparada, el reciclado proveniente de la condensación de los vapores extraídos del mismo reactor, y del condensado proveniente de la extracción al final del proceso, en fase de vapor, de la fracción de la masa no convertida en polímero durante su paso por el tren.

En el esquema del proceso productivo¹⁰, el precalentador es un intercambiador de calor que lleva la alimentación a una temperatura cercana a la de operación del primer reactor, el reactor R-1 es el reactor tipo tanque agitado (CSTR) en el cual se controla su temperatura de operación mediante una ebullición controlada de estireno y etilbenceno que luego son condensados en el intercambiador E-2, los reactores R-2 y R-3 son los reactores siguientes. Las bombas B-1, B-2 y B-3 son bombas de desplazamiento positivo que transportan el producto entre las diferentes etapas productivas. El intercambiador E-1 es un intercambiador de calor que calienta el producto a una temperatura suficiente para que al pasar por los tanques DV-1 y DV-2, los cuales operan a bajas presiones absolutas, para que se vaporice el estireno que no reaccionó junto con el etilbenceno y sean condensados en el intercambiador E-3 y luego almacenado en el tanque T-6 junto a los vapores condensados en el intercambiador E-2 para ser enviados nuevamente a la alimentación mediante la bomba B-6.

¹⁰ Tomado del documento titulado “Modelación matemática y simulación dinámica del proceso de prepolimerización de estireno”. Darío Gutiérrez, Oscar S. Acuña, Dr. José L. Villa. Universidad Autónoma de Bucaramanga. 2005. Pág. 8

El proceso de polimerización se va llevando a cabo de manera isotérmica en cada uno de los reactores con un perfil de temperatura ascendente entre cada uno de los reactores. El primer reactor trabaja en un rango de 115 a 120 °C, mientras que el segundo reactor trabaja con una temperatura de alrededor de 145 °C y el tercero trabaja con una temperatura cercana a 170°C. A la salida del último reactor se consiguen conversiones totales del proceso de alrededor del 80%. Es decir que el 80% del estireno monómero se convierte en poliestireno.

2.3. REACTOR TANQUE AGITADO – CSTR

Dentro de las diferentes fases del proceso de prepolimerización sin duda alguna que el papel del reactor tanque agitado es el más importante debido a la incidencia que tiene en el acondicionamiento del producto en su fase previa¹¹. En la figura 5¹² se muestra una fotografía de un reactor de esta clase utilizado en laboratorio. El tamaño de estos equipos dependerá de la cantidad de materia prima involucrada en el proceso.

¹¹ Tomado del documento titulado “Modelación matemática y simulación dinámica del proceso de prepolimerización de estireno”. Darío Gutiérrez, Oscar S. Acuña, Dr. José L. Villa. Universidad Autónoma de Bucaramanga. 2005. Pág. 5

¹² Ibid 3.



Figura 5. Fotografía de un reactor tanque agitado utilizado en laboratorio.

Para este tipo de reactor se ilustra el estado del arte y diferentes avances que se realizan para el desarrollo de herramientas computacionales para el modelamiento matemático y simulación dinámica de estos equipos de prepolimerización. En la figura 6¹³ se muestran los componentes básicos que posee un CSTR.

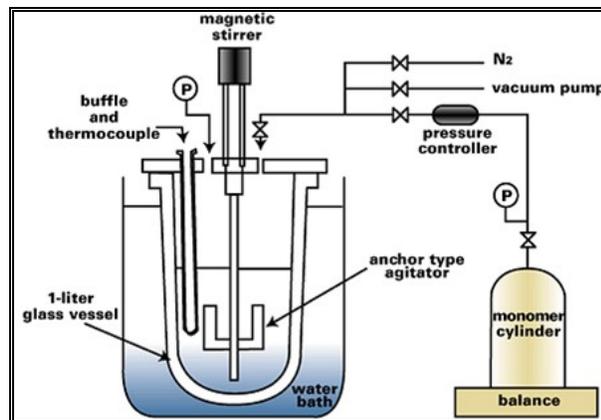


Figura 6. Componentes básicos de un CSTR

¹³ Ibid 3.

3. PERSPECTIVA ACTUAL SOBRE LAS HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES PARA EL MODELAMIENTO MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN DINAMICA

El diseño de estrategias de control clásico y avanzado requiere normalmente de desarrollos teóricos y de simulaciones dinámicas, que deben basarse en un modelo matemático del proceso a controlar. El modelado matemático debe representar (con cierto grado de aproximación) el comportamiento dinámico de las principales variables de interés. Como la gran mayoría de los procesos reales poseen características no lineales, su representación natural se efectúa mediante un modelo matemático que involucra normalmente un conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales¹⁴.

Adentrarse en el área de la simulación de procesos en Ingeniería Química impone recurrir someramente a la historia de la simulación, su definición y las áreas que abarca. En los primeros pasos, la simulación de procesos se basaba principalmente en circuitos analógicos, utilizando los fenómenos de analogía¹⁵. En efec-

¹⁴Tomado del documento titulado “Modelación matemática y simulación dinámica del proceso de prepolimerización de estireno”. Darío Gutiérrez, Oscar S. Acuña, Dr. José L. Villa. Universidad Autónoma de Bucaramanga. 2005. Pág. 15.

¹⁵ Tomado del libro “Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos”. Nicolás J. Scenna y col., U.T.N. - CONICET. Grupo de Investigación en Informática Aplicada a la Ingeniería Química (G.I.A.I.Q. - U.T.N. Rosario). Editor: N Scenna - UTN, ISBN: 950-42-0022-2, XXI Capítulos, Buenos Aires, (Diciembre) 1999.

to, la teoría de sistemas muestra que diversos principios físicos tienen asociados modelos matemáticos equivalentes o isomórficos. Por ejemplo, ciertos circuitos eléctricos, circuitos hidráulicos, procesos de transferencia tanto de materia como energía y cantidad de movimiento, son descritos por el mismo conjunto de ecuaciones diferenciales. Consecuentemente, podría resultar conveniente analizar (simular analógicamente) el comportamiento de un sistema (proceso químico) observando la evolución de las variables "equivalentes" en un circuito eléctrico (cuyo modelo es equivalente -isomorfo- al proceso estudiado), ya que son fácilmente medibles. Posteriormente, a partir del uso masivo de la computadora digital, y de la revolución que implica la informática en todos los campos de la ingeniería, se evoluciona lentamente de la simulación analógica a la digital, desapareciendo prácticamente la primera en muchas aplicaciones.

Los modelos matemáticos se usan en diferentes áreas de la ingeniería entre estas se tienen¹⁶:

-  Investigación y desarrollo. Como por ejemplo en actividades como desarrollo de nuevos productos,
-  Diseño de plantas.

¹⁶ LUYBEN, W.L.. Process modeling, simulation and control for chemical engineers. Segunda edición Editorial McGraw-Hill 1990. ISBN 0-07-039159-9.

- ✚ Optimización en la operación de las plantas de proceso. Como por ejemplo en la obtención de parámetros óptimos de las variables de proceso, tales como temperatura, presión, etc.

El desarrollo de un modelo matemático para un proceso químico consta de las siguientes fases¹⁷:

1. Aplicación de las leyes fundamentales, desarrollando los balances de materia, energía y momento combinado con las ecuaciones termodinámicas y de cinética química.
2. Simplificación del modelo matemático. En esta etapa se usa el criterio ingenieril para simplificar el modelo de tal forma que su solución pueda desarrollarse de manera óptima mediante las técnicas de los métodos numéricos sin sacrificar precisión en los resultados esperados.
3. Verificación de la consistencia matemática del modelo. En esta etapa lo que se busca es que el modelo matemático tenga los grados de libertad requeridos para su solución. En otras palabras que el número de ecuaciones independientes una de otra correspondan con el número de variables que hacen parte del modelo matemático.

¹⁷ Ibid 5.

4. Solución de las ecuaciones del modelo. Esta fase se desarrolla mediante las técnicas de métodos numéricos, de tal forma que se permita solucionar el modelo usando software.
5. Verificación. En esta fase se busca validar el modelo, comparando los resultados obtenidos en la simulación con los resultados reales, empleando tantas herramientas de validación como sea posible.

En los últimos años, se han logrado significativos avances en el campo del desarrollo de nuevos métodos y herramientas para modelar determinados procesos. Existe abundante información técnica sobre estas herramientas encaminadas a desarrollar mejoras en los productos finales. Diferentes publicaciones auspiciadas por prestigiosos centros educativos y empresas del sector químico describen técnicas complejas para el modelamiento y simulación de estos procesos. A continuación se mencionan diferentes artículos de entidades reconocidas donde se ilustran las diferentes técnicas que se han desarrollado para el CSTR en los últimos 15 años. En un aparte de la publicación de IEEE¹⁸ denominada *Decision and Control*, en 1991, el laboratorio Koninklijke-Shell de Holanda, en un artículo titulado *Application of the grey-box approach to parameter estimation in physicochemical models* [1], explica como el concepto de lógica difusa puede ser aplicado a ciertos modelos rigurosos. La idea de esta investigación es simplificar la estructura del modelo (trabajando en tiempo discreto), tal que tome la forma característica del concepto de lógica difusa. Paralelamente, se muestran las carac-

¹⁸ IEEE: Institute of Electrical and Electronics Engineers

terísticas del proceso resaltadas y transformadas para suministrar los alcances de la técnica de lógica difusa. Como resultado, la estimación de los resultados se vuelve más transparente y estos pueden ser obtenidos con considerable disminución de recursos computacionales en comparación a la forma estándar de obtención de parámetros. Además, los componentes más generales del modelo (Ej.: el ruido del sistema) pueden ser manejados con relativa facilidad. Los pros y contras de esta aproximación son demostrados con la estimación de parámetros en un CSTR.

En el año siguiente, *The Howard P. Isermann Department of Chemical Engineering*, en Estados Unidos, publica un artículo [2] interesante titulado *CSTR Performance limitations due to cooling jacket dynamic*, que trata sobre el comportamiento dinámico y estático que exhibe un CSTR, a pesar que se utilice un modelo de dos estados. Añadiendo un tercer estado se justifica el comportamiento dinámico de la chaqueta de enfriamiento y la influencia en el comportamiento en lazo abierto y cerrado para un CSTR. En este artículo se muestra que un controlador en cascada en el interior del lazo se asume implícitamente en el modelo de dos estados, por que el modelo de tres estados puede ser inestable en lazo abierto en regiones donde el modelo de dos estados es estable en lazo abierto. También se observa el efecto de los parámetros del proceso para la estabilidad en lazo abierto para los modelos de dos y tres estados del CSTR. De igual forma, se ilustra que cuando el CSTR trabaja en un punto de operación inestable en lazo abier-

to, existen ceros a la derecha del plano en la función de transferencia del proceso, causando una innata limitación en el desempeño del sistema en lazo cerrado.

Hacia el año 1994, en la publicación de IEEE, *Control Theory and Applications*, el departamento de Ingeniería de la Universidad de Zhejiang, China, en un artículo titulado *Supervised learning control of a nonlinear polymerization reactor using the CMAC¹⁹ neural network for knowledge storage* [3], se ilustra la forma en que es adaptado un sistema para representar funciones no lineales complejas apoyándose en tablas de búsquedas²⁰. La red se emplea para el control aprendido de un CSTR, ampliamente utilizado como reactor de polimerización. El estudio involucra la estimación *online* de condiciones no medibles y el ajuste en tiempo real de *set-point* de las dos entradas y las dos salidas de un CSTR. Los resultados de la simulación muestran que el método CMAC es robusto en el autoaprendizaje, fácil de implementar y práctico para el mejoramiento del desempeño del control no lineal.

Para el año de 1998, en la *American Control Conference*, un artículo desarrollado en el Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Florida – USA, titulado *Discretization of nonlinear models using a modified Carleman linearization technique* [4], explica como se modifica el procedimiento de linealización Carleman(1932) para la discretización de modelos dinámicos no lineales en aplicaciones de control digital. Los términos omitidos de una abreviada Serie de Taylor son aproximados como una combinación de términos. El proceso en si, involucra

¹⁹ *CMAC: Cerebellar model articulation controller.*

²⁰ Traducción literal de “lookup tables”

una serie de parámetros ajustables, los cuales son determinados por medio de la optimización. La integración de modelo lineal resultante sobre un período de muestreo entrega un modelo analítico en el tiempo discreto. Al final, se obtienen excelentes modelos discretos de bajo orden en un estudio que involucra el modelo no lineal de un reactor isotérmico tipo CSTR. La técnica muestra una mayor precisión por encima de la aproximación del mismo orden que se obtiene con la aproximación Carleman.

En el mismo año, el *Technical Department Omega Simulation of Mitsui Chemicals*, en Osaka, Japón, en el artículo titulado *An Application of Dynamic Simulation in Advanced Control* [5], describe su investigación basándose en la existencia de tres sistemas primarios para los cuales se aplican los simuladores *online*, *quasi-online* y *offline*. Considerando los simuladores de procesos convencionales, los simuladores estáticos y dinámicos han sido usados en sistemas *offline*. Sin embargo, este artículo en forma general, ilustra los simuladores dinámicos aplicados en sistemas *online* para el proceso de polimerización de polipropileno. La simulación de estos rigurosos modelos se logró utilizando un simulador dinámico de funciones únicas, los cuales aceleran los cálculos de cada unidad del modelo, teniendo en cuenta las propiedades físicas y especialmente el balance del flujo de presión en la red de la planta. Los datos de operación fueron incorporados en el sistema *online* y con los datos obtenidos, se obtuvieron las condiciones iniciales para los modelos. La simulación se llevó a cabo basándose en las condiciones iniciales empleando cierto número de fórmulas potenciales. Después de encontrar la fórmula

óptima, se aplicó en la operación actual. En forma meticulosa se integró un sistema, y como resultado, las operaciones de la planta tuvieron mejoras significativas. De este modo se consiguió aumentar la eficiencia del trabajo y la productividad de las operaciones de Mitsui Chemicals.

En el año 2001, en Francia, la *École Nationale Supérieure des Mines de Paris*, en el artículo titulado *Control of an industrial polymerization reactor using flatness* [6], muestra como se diseñó y se implementó una técnica de control para el reactor de polipropileno más grande del mundo. Este es el primer controlador de procesos industriales que utiliza la denominada propiedad de “*flatness*” del sistema, presentándola de una manera concisa y orientada a aplicaciones. Se muestran los resultados y la estrategia de control en el contexto del rápido y competitivo mercado de los polímeros.

Desde el año 2002 se tienen los mayores avances investigativos en este campo. En la *American Control Conference*, se publica un artículo [7] que trata sobre la omnipresencia de los DPS²¹ en la industria. Los métodos de control existentes para estos sistemas usualmente involucran complicados cálculos *online* que provocan comportamientos oscilatorios en el proceso, producto de frecuentes cambios en el control. El artículo propone un MDC²² para DPS utilizando métodos de carac-

²¹ Distributed Parameter Systems.

²² Model Predictive Control.

terísticas. Como aplicación industrial, se muestra una simulación en un reactor de flujo para ilustrar la simulación propuesta.

En la misma publicación aparece un artículo [8] que describe un modelo dinámico para la polimerización de polipropileno en un CSTR con un proceso *Hypol*²³. Se utiliza para inferir, en forma *online*, el índice de mezclado del polipropileno. Contiene un modelo mecanicista que abarca el equilibrio gas-líquido, equilibrio cinético de la polimerización, balance de material y un simplificado balance energético. El índice de mezclado puede ser calculado utilizando los datos de operación de un reactor industrial. Para eliminar el error en el modelo producto de la incertidumbre y perturbaciones del proceso, se emplea un recursivo método de predicción del error para actualizar los parámetros del modelo en aplicaciones *online*. Se muestra que este modelo dinámico presenta gran adaptabilidad durante transiciones graduales y puede ser aplicado en forma *online* para inferir el índice de mezcla del polipropileno.

Para el año 2003, *Department of Chemical Engineering University of Malaya*, en Malasia, publica un artículo [9] interesante sobre el uso de diagramas de bloque de Simulink para resolver modelos matemáticos y ecuaciones de control. Esta herramienta es usada para resolver un modelo formado por un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias y de ecuaciones algebraicas para el control de la temperatura dentro de un tanque calentador con agitador. La flexibilidad del dia-

²³ Proceso especial para polimerización del polipropileno.

grama de bloque de Simulink da a los estudiantes una mejor comprensión de los sistemas de control. Simulink también permite solucionar modelos matemáticos y facilita la visualización de sistemas de varias variables. Con la aplicación industrial en un reactor de polietileno se ponen en práctica las políticas de control y se muestran sus consecuencias.

A nivel nacional, El departamento de Ingeniería Química de la Universidad Nacional de Colombia, en Bogotá, presenta una tesis [10] sobre un módulo simulador de reactores químicos. En la primera sección se realiza todo el desarrollo teórico de los modelos matemáticos empleados para la simulación de reactores químicos ideales, incluyendo lo relacionado con equilibrio químico, reactores tubulares y de tanque agitado. Adicionalmente se presentan aplicaciones en computador para cada uno de estos modelos, que generalizan el cálculo desde el punto de vista numérico. En la segunda sección se presentan en detalle formulaciones y algunos casos desarrollados para tópicos particulares del diseño de reactores, tales como pastillas catalíticas porosas, reactores de polimerización, reactores con dispersiones radiales y axiales. En uno de los apéndices se hace el ajuste de parámetros de uno de los modelos generados, a un reactor de escala industrial.

En México, el Departamento de Ingeniería y Ciencias Químicas de la Universidad Iberoamericana, publica un artículo [11] que trata sobre un análisis de *full scale* para el proceso de producción del poliestireno de alto impacto. En este documento se lleva a cabo un análisis de bifurcación no lineal en lazo abierto del pro-

ceso de poliestireno de alto impacto, enfocado al diseño óptimo del proceso, análisis de la operación y el control. El proceso se describe como un conjunto de siete CSTR conectados en serie. El desarrollo se lleva a cabo con condiciones normales, punto de operación nominal inestable en lazo abierto y de acuerdo a condiciones de operación industriales típicas. Para los siete CSTR en cascada, se encontraron más de ciento cincuenta estados estacionarios, donde solo se consideran once como industrialmente factibles pero, nueve de estos son inestables en lazo abierto. También se tiene en cuenta la diversidad de entradas y salidas y sus implicaciones en transiciones graduales.

4. EXPOSICIÓN SOBRE LAS TECNICAS MÁS USADAS EN EL MODELAMIENTO Y SIMULACION DE PROCESOS QUIMICOS.

4.1. CLASIFICACIÓN DE LOS MÉTODOS DE SIMULACIÓN

Se puede considerar a la tarea de simulación como aquella en la cual se proponen ciertos valores de entrada al simulador o programa de simulación para obtener ciertos resultados o valores de salida, de tal manera que evalúen el comportamiento del sistema real bajo esas condiciones. Las herramientas de simulación pueden clasificarse según diversos criterios, por ejemplo, según el tipo de procesos (batch o continuo), si involucra el tiempo (estacionario o dinámico -incluye a los equipos batch-), si maneja variables estocásticas o determinísticas, variables cuantitativas o cualitativas, etc.²⁴. A continuación se expondrán brevemente las características de los distintos tipos de herramientas de simulación generalmente utilizadas.

²⁴ Tomado del libro “Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos”. Nicolás J. Scenna y col., U.T.N. - CONICET. Grupo de Investigación en Informática Aplicada a la Ingeniería Química (G.I.A.I.Q. - U.T.N. Rosario). Editor: N Scenna - UTN, ISBN: 950-42-0022-2, Capítulo V, Buenos Aires, (Diciembre). Pág.: 193. 1999.

4.1.1. Simulación cualitativa y cuantitativa.

La simulación cualitativa tiene por objeto principalmente el estudio de las relaciones causales y las tendencias temporales cualitativas de un sistema, así como también la propagación de perturbaciones a través de un proceso dado. Se le llama, valor cualitativo de una variable, a la diferencia del valor numérico (cuantitativo), a su signo; ya sea absoluto, o bien con relación a un valor dado o de referencia. En general, se trabaja con valores tales como (+, -, 0). Son varios los campos de aplicación de la simulación cualitativa, como por ejemplo: análisis de tendencias, supervisión y diagnosis de fallas, análisis e interpretación de alarmas, control estadístico de procesos, etc.

La simulación cuantitativa, en cambio, es aquella que describe numéricamente el comportamiento de un proceso, a través de un modelo matemático del mismo. Para ello se procede a la resolución de los balances de materia, energía y cantidad de movimiento, junto a las ecuaciones de restricción que imponen aspectos funcionales y operacionales del sistema. La simulación cuantitativa abarca principalmente la simulación en estado *estacionario* y la simulación en estado *dinámico*²⁵.

²⁵ Tomado del libro titulado "System Identification: Theory for the User". Lennart Ljung. Prentice Hall. 1986.

4.1.1.1. Simulación estacionaria y dinámica.

La simulación en estado estacionario implica resolver los balances de un sistema sin involucrar la variable temporal, por lo que el sistema de ecuaciones tiene como finalidad estudiar o reflejar en el modelo las variaciones de las variables de interés con las coordenadas espaciales (modelos a parámetros distribuidos); entonces, deberá utilizarse un sistema de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales (según el número de coordenadas espaciales consideradas). Un ejemplo puede ser la variación radial de la composición en un plato para una columna de destilación, la variación de las propiedades con la longitud y el radio en un reactor tubular, etc. Por lo general, en simuladores comerciales (no específicos) se utilizan modelos a parámetros concentrados. Por otra parte, y como su nombre lo indica, la simulación dinámica plantea los balances en su dependencia con el tiempo, ya sea para representar el comportamiento de equipos batch, o bien para analizar la evolución que se manifiesta en el umbral entre dos estados estacionarios para un equipo o una planta completa. En este caso, el modelo matemático estará constituido por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias cuya variable diferencial es el tiempo, en el caso de modelos a parámetros concentrados. En caso contrario, se deberá resolver un sistema de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales, abarcando tanto las coordenadas espaciales como la temporal (parámetros distribuidos)²⁶.

²⁶ Tomado del libro titulado: "A Modeling Language for Process Engineering. Part I: The formal framework" Henning, G., Leone, H., Stephanopoulos; Computers and Chemical Engineering, 14, 8, 1990.

4.1.1.2 Simulación determinística y estocástica

Desde el punto de vista de los fenómenos o sistemas que se estudien, la simulación también puede clasificarse en *determinística o estocástica*²⁷. Como modelo determinístico se considera aquél en el cual las ecuaciones dependen de parámetros y variables conocidas con certeza, es decir que no existe incertidumbre ni leyes de probabilidades asociadas a las mismas. En cambio en un modelo estocástico, como su nombre lo indica, ciertas variables estarán sujetas a incertidumbre, que podrá ser expresada por funciones de distribución de probabilidad. En este caso, por lo tanto, los resultados del modelo estarán asociados a una ley de probabilidad.

Por último, también debe mencionarse *la simulación de eventos discretos*, en la cual existen variables de interés que no tienen un comportamiento continuo. Existen numerosos procesos que sólo pueden simularse desde este punto de vista. Por ejemplo, la simulación o diseño de plantas batch multiproducto o multipropósito, o ambas simultáneamente, poseen características que imponen un modelo discreto para contemplar ciertos eventos de interés.

Debe diferenciarse la noción de un simulador general de procesos químicos de un programa de simulación de equipos o unidades operacionales aisladas. En efecto, mientras que para estas últimas, sólo se requiere el modelo del equipo y un sis-

²⁷ Tomado del libro titulado "System Identification: Theory for the User". Lennart Ljung. Prentice Hall. 1986.

tema de entrada/salida de datos para comunicarse eficientemente con el usuario, cabe destacar que programar un simulador de uso general conlleva varios problemas²⁸ que mencionamos a continuación: En primer lugar deberá contemplarse una biblioteca de módulos individuales para poder simular distintas operaciones o equipos de proceso. Deberá programarse la forma de interacción de los equipos de acuerdo al flowsheet de la planta; además de la metodología de ingreso de los datos, tanto de la estructura (flowsheet) como de cada unidad individual. Obviamente, dependerá del tipo de estructura del flowsheet (con reciclos, lineal, etc.) la complejidad matemática para resolver los balances correspondientes, ya que por lo general deberá recurrirse a métodos iterativos. El orden y la secuencia de cálculo dependerán de cada caso en particular, y será un nuevo aspecto a tener en cuenta en la programación del simulador. En resumen, deberán utilizarse métodos numéricos para la resolución de sistemas de ecuaciones no lineales tanto algebraicas como diferenciales, así como técnicas de rasgado, particionado y ordenamiento.

Por otra parte, los aspectos vinculados a los cálculos de estimación de propiedades fisicoquímicas son bastante diferentes si se plantea el problema de un equipo dado procesando una mezcla determinada o bien un sistema generalizado capaz de simular diversos procesos de separación (por ejemplo mezclas ideales,

²⁸ Tomado del libro titulado: "Curso Latinoamericano de diseño de procesos por computadora", Parte I (tomo II): Simulación de procesos por computadora" Cerro R. L., Arri L. E., Chiovetta M. G. y Perez G.; Agosto de 1978, INTEC, Sta. Fe, Argentina.

no ideales, etc.). En este caso, deberá contarse con un sistema de estimación de propiedades generalizado, lo que se convierte en un problema²⁹. En efecto, deberá tener capacidad de calcular las propiedades fisicoquímicas y termodinámicas (viscosidad, densidad, capacidades caloríficas, entalpías, constantes de equilibrio, etc.) tanto para sustancias puras como para mezclas. Resulta muy difícil el cálculo de propiedades tales como coeficientes de difusividad en mezclas líquidas, o bien las constantes de equilibrio en mezclas no ideales o en presencias de electrolitos.

En definitiva, son numerosos los aspectos instrumentales y metodológicos que deben superarse al diseñar un simulador de propósitos generales. Dentro de este contexto, resulta muy importante comprender esta problemática para lograr un conocimiento más profundo de la forma de operar de los principales simuladores comerciales comúnmente utilizados para la simulación de procesos químicos. Basta con mencionar que el diseño e implementación definitiva desde los primeros esbozos hasta la versión de uso comercial de un simulador típico es una tarea que involucra varios cientos de miles de horas hombre, y es además una tarea continua ya que los sistemas comerciales están incorporando constantemente nuevos métodos de resolución, o de estimación de propiedades, etc., generando nuevas versiones periódicamente. En los puntos siguientes se tratará de describir brevemente los principales aspectos estructurales vinculados a la arquitectura de un sistema típico de simulación de procesos químicos, en forma muy general.

²⁹ Tomado del libro titulado: "Simulation of Single- and Multiproduct Batch Chemical Plants for Optimal Design and Operation" Rippin D.W.T, Comput. Chem. Engng., Vol 7, No. 3, pp 137-156, 1983

Los simuladores de procesos pueden dividirse en los siguientes tipos según la filosofía bajo la cual se plantea el modelo matemático que representa el proceso a simular³⁰:

- ✚ Simuladores globales u orientados a ecuaciones
- ✚ Simuladores secuenciales modulares
- ✚ Simuladores híbridos o modular secuencial-simultáneo

Bajo el enfoque de la *simulación global u orientada a ecuaciones*, se plantea el modelo matemático que representa al proceso construyendo un gran sistema de ecuaciones algebraicas que representa a todo el conjunto o planta a simular. De esta forma el problema se traduce en resolver un gran sistema de ecuaciones algebraicas, por lo general altamente no lineales.

Los simuladores *modulares secuenciales* se basan en módulos de simulación independientes que siguen la misma filosofía que las operaciones unitarias, es decir, cada equipo: bomba, válvula, intercambiadores, etc.; son modelados a través de modelos específicos para los mismos y además, el sentido de la información coincide con el “flujo físico” en la planta. Cada sistema de ecuaciones es resuelto con una metodología que resulta adecuada para el mismo, así es posible analizar bajo las circunstancias posibles, el método de resolución propuesto.

³⁰ Ibid 24.

4.2. IDENTIFICACION DE SISTEMAS

Debido a que los sistemas dinámicos abundan en el ambiente industrial, las técnicas de identificación de sistemas han cobrado gran relevancia en diversas áreas del conocimiento (ingenierías, economía, biotecnología, etc.), donde se requiere de un modelo preciso para fines de análisis, predicción, simulación, diseño y control. En particular, las técnicas de control actuales requieren de modelos matemáticos cada vez más exactos para el análisis y el diseño. Siendo que en muchos casos, tales modelos no pueden ser obtenidos en forma sencilla y económica a partir de las leyes que rigen cada proceso. Aquí es entonces donde juega un papel decisivo la Identificación de Sistemas Dinámicos, que es una herramienta capaz de proporcionar los métodos necesarios para obtener de manera relativamente sencilla los modelos matemáticos buscados con alto grado de exactitud³¹.

La identificación de sistemas no lineales se considera un problema difícil [12]. La razón es que identificar un sistema no-lineal conlleva dos grandes etapas: la selección de la estructura del modelo con un cierto número de parámetros y la selección de un algoritmo que estime dichos parámetros. En la literatura han sido propuestos numerosos modelos lineales como solución al proceso de identificación.

³¹ Tomado del libro titulado “Identificación de Sistemas Dinámicos”. Introducción. Cristian Kunush. Universidad Nacional de la Plata. Facultad de Ingeniería. Departamento de Electrónica. Pág. 1. Año 2003.

Estos modelos son simples, como OE³² y ARX³³ por ejemplo. En este caso podemos elegir un algoritmo sencillo para estimar los parámetros del modelo.

Aunque muchos sistemas no-lineales pueden ser linealizados representándolos por medio de una ecuación diferencial o en diferencias, modelar sistemas no-lineales con modelos lineales implica muchas aproximaciones. Con frecuencia, estas aproximaciones no reflejan suficientemente el comportamiento real del sistema no lineal. Por tanto, obtener un buen modelo, con una estructura que refleje la información real del sistema, exige un incremento en costo. Este costo es debido a la necesidad de algoritmos más avanzados que puedan manejar modelos con estructuras complejas. Los modelos pueden ser paramétricos, para los cuales se tiene la ventaja de estar dados por un conjunto pequeño de coeficientes, o bien no paramétricos como las redes neuronales, que tienen la ventaja de no estar restringidas a un cierto número de descripciones posibles del modelo.

El término *Identificación de sistemas* fue acuñado por Lofti Zadeh [13] en 1962, como:

Identificación es la determinación, en base a la entrada y la salida, de un sistema, dentro de una clase de sistemas especificada, al cual el sistema probado es equivalente.

³² Output Error

³³ Auto Regresive with eXogenous inputs

Puede decirse que la identificación de sistemas quedó establecida como un campo de investigación reconocido dentro del área de control automático a mediados de los sesenta: en el tercer congreso de la IFAC en Londres, 1966 en el que fue presentado un artículo de visión general sobre identificación de sistemas. Un año después fue organizado el primer Symposium IFAC sobre identificación de sistemas en Praga. En la actualidad es el Symposium con una serie mas larga de la IFAC.

La teoría sobre identificación de sistemas está reunida, por ejemplo, en los libros de Ljung [14] y de Söderstrom y Stoica [15], donde también se pueden encontrar numerosas referencias.

4.2.1 Modelos de sistemas dinámicos.

Cuando se trabaja con un modelo de un sistema, se tiene cierta idea de cómo las variables están relacionadas entre sí³⁴. Desde un punto de vista general, se puede decir que las relaciones observadas son un modelo del sistema. Está claro que los modelos pueden venir dados por diferentes estructuras y con distintas formulaciones matemáticas. El uso deseado del modelo también determina el grado de sofisticación requerido. El modelado e identificación de sistemas no-lineales es, en

³⁴ Tomado del libro titulado “Identificación de Sistemas Dinámicos”. Fundamentos y Estado del Arte. Cristian Kunush. Universidad Nacional de la Plata. Facultad de Ingeniería. Departamento de Electrónica. Pág. 2. Año 2003.

buena medida, un problema dependiente de las aplicaciones y que frecuentemente tiene sus raíces en la tradición y en las técnicas específicas del área de aplicación.

Problema típico. Se observan las entradas $u(t)$ y las salidas $y(t)$ de un sistema, con $t = 1, \dots, N$. Se desea construir el modelo de un sistema para buscar un modelo sencillo de la forma:

$$y(t) + a_1 y(t - 1) = b_1 u(t - 1) + b_2 u(t - 2) \quad (1)$$

Es necesario determinar los valores de los parámetros a_1 , b_1 , y b_2 . Esto puede ser hecho por medio del conocido método de mínimos cuadrados

$$\min_{a_1, b_1, b_2} = \sum_{t=1}^N (y(t) + a_1 y(t - 1) - b_1 u(t - 1) - b_2 u(t - 2))^2 \quad (2)$$

Los valores $\hat{a}_1^N, \hat{b}_1^N, \hat{b}_2^N \dots$ pueden ser calculados fácilmente en este caso puesto que (2) es una función cuadrática. Se obtiene el modelo del sistema:

$$y(t) + \hat{a}_1^N y(t - 1) = \hat{b}_1^N u(t - 1) + \hat{b}_2^N u(t - 2) \quad (3)$$

Este sencillo problema de identificación de sistemas es un caso especial de la amplia clase de problemas de construcción de modelos.

4.2.2. Modelo de entrada-salida.

Un modelo de entrada-salida describe un sistema dinámico basándose en los datos de entrada y de salida³⁵. Este tipo de modelos supone que la salida del sistema puede ser predicha a partir de las entradas y salidas pasadas del sistema. Si el sistema se supone, además determinista, invariante en el tiempo, de una entrada y una salida (SISO³⁶), el modelo de entrada-salida es:

$$y(k) = f(y(k-1), y(k-2), \dots, y(k-n), u(k-1), u(k-2), \dots, u(k-m)) \quad (4)$$

Donde $u(k)$, $y(k)$ representa el par de entrada-salida en el tiempo k . Los enteros positivos n y m son el número de salidas pasadas (también llamado el orden del sistema) y el número de entradas pasadas. En la práctica m es, normalmente, menor o igual que n . f puede ser cualquier función no-lineal definida desde el espacio de entradas y salidas pasadas hasta el espacio de salidas futuras. Si el sistema es lineal, f es una función lineal y la ecuación anterior puede ser reescrita como:

$$y(k) = a_1y(k-1) + a_2y(k-2) + \dots + a_ny(k-n) + b_1u(k-1) + b_2u(k-2) + \dots + b_mu(k-m) \quad (5)$$

³⁵ Tomado del libro titulado "Identificación de Sistemas Dinámicos". Fundamentos y Estado del Arte. Cristian Kunush. Universidad Nacional de la Plata. Facultad de Ingeniería. Departamento de Electrónica. Pág. 3. Año 2003.

³⁶ Single In- Single Out

4.2.3. Modelos paramétricos lineales.

El estado actual de la estimación de parámetros en la identificación de sistemas corresponde a la teoría clásica de la regresión. Es una necesidad para el futuro de la identificación de sistemas comprender en profundidad los relevantes desarrollos estadísticos en análisis de la regresión, como los expuestos en los libros de Carroll y Ruppert [16] y de McCullagh y Nelder [17]. Algunos de los modelos lineales más conocidos son:

- ARX (Auto-Regressive with eXogenous inputs), cuya expresión es:

$$A(q^{-1})y(t) = B(q^{-1})u(t - nk) + e_k \quad (6)$$

que puede ser visto como una manera de determinar el siguiente valor de la salida dadas las observaciones ya las entradas anteriores. Aquí $A(q^{-1})$ y $B(q^{-1})$ son polinomios en el operador desplazamiento hacia atrás q^{-1} e $y(t)$, $u(t)$, y $e(t)$ son las salidas, entradas y ruido, respectivamente. El ruido $e(t)$ es una sucesión aleatoria normalmente distribuida de media cero y varianza σ^2 .

- OE (Output Error) cuya expresión es:

$$y(t) = \frac{B(q^{-1})}{F(q^{-1})}u(t - nk) + e(t) \quad (7)$$

Con la fuente de error $e(t)$ que es la diferencia (error) entre la salida real y la salida libre de ruido (teórica).

- ARMAX (Auto-Regressive Moving Average with eXogenous inputs), cuya expresión es:

$$A(q^{-1})y(t) = B(q^{-1})u(t - nk) + C(q^{-1})e(t) \quad (8)$$

En éste modelo la expresión $A(q^{-1})y(t) = e(t)$ representa la auto-regresión, $y(t) = C(q^{-1})e(t)$ representa la media móvil de ruido blanco, mientras que $B(q^{-1})u(t)$ representa la entrada externa. Otros modelos pueden ser usados, como por ejemplo la representación en el espacio de estados o el modelo de ceros y polos.

4.2.4. Modelos paramétricos no-lineales.

La identificación de modelos matemáticos en forma de modelos lineales de una entrada - una salida está bien desarrollada en cuanto a la determinación de parámetros y determinación de la estructura. Sin embargo, se considera difícil aplicar con precisión la identificación de sistemas lineales a sistemas no-lineales. Un punto de vista pesimista es mirar a los sistemas no-lineales como el complementario de la clase de sistemas para los cuales existen métodos sistemáticos de identificación³⁷.

Algunos resultados interesantes son: el artículo de Johnson [18] sobre regresión no-paramétrica y el libro de Grenander [19]. Se supone que se ha escogido una

³⁷ Tomado del libro titulado "Identificación de Sistemas Dinámicos". Fundamentos y Estado del Arte. Cristian Kunush. Universidad Nacional de la Plata. Facultad de Ingeniería. Departamento de Electrónica. Pág. 5. Año 2003.

base del espacio de funciones $\{g_k\}$, para intentar aproximar la verdadera relación como una combinación lineal finita de las funciones de la base:

$$\hat{y}(t|\theta) = g(\varphi(t), \theta) = \sum_{k=1}^n \theta(k)g_k(\varphi(t)) \quad (9)$$

Donde $\varphi(t)$ está formado por las entradas $u(k)$ y salidas $y(k)$ pasadas:

$$\varphi(t) = [y(t-1), \dots, y(t-n_a), u(t-1), \dots, u(t-n_b)]^T \quad (10)$$

y se ha introducido la notación $\hat{y}(t|\theta)$ para hacer hincapié en que $g(\varphi(t), \theta)$ es una estimación de $y(t)$ dada la información $\varphi(t)$ y un vector de parámetros dado θ .

El mejor valor de θ está determinado entonces por el conjunto de datos

$$Z^N = \{[y(t), \varphi(t)] | t = 1, \dots, N\} \quad (11)$$

y será:

$$\hat{\theta}_N = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} \sum_{k=S}^N |y(t) - \hat{y}(t|\theta)|^2 \quad (12)$$

4.2.4.1. Modelos paramétricos No-lineales: Series y Modelos

Series de Volterra: Las series de Volterra son desarrollos en serie que consisten en términos lineales, bilineales y trilineales. Términos de mayor orden pueden ser incluidos para algunas aplicaciones. Una serie de Volterra con un orden y un retardo apropiadamente escogidos pueden ser usados para modelar sistemas dinámicos no-lineales. Las series de Volterra vienen descritas por la expresión:

$$\begin{aligned}
y(k) &= \sum_{i=0}^{\infty} a_i u(k-i) \\
&+ \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} b_{ij} u(k-i) u(k-j) \\
&+ \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} c_{ijl} u(k-i) u(k-j) u(k-l) \\
&+ \dots
\end{aligned} \tag{13}$$

El vector u representa la señal de entrada, el vector y la salida del modelo. Para sistemas estables las series infinitas pueden ser truncadas sin problemas si el límite superior de la suma es lo suficientemente alto. Entonces la ecuación anterior puede ser simplificada como:

$$\begin{aligned}
y(k) &= \sum_{i=0}^{N-1} a_i u(k-i) \\
&+ \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} b_{ij} u(k-i) u(k-j) \\
&+ \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} c_{ijl} u(k-i) u(k-j) u(k-l) \\
&+ \dots
\end{aligned} \tag{14}$$

De hecho, la mayoría de los estudios en ésta área se limitan a series de Volterra de segundo o tercer orden. Las series de Volterra pueden ser representadas en notación vectorial:

$$y(k) = a_1^T x_1 + b_2^T x_2 + c_3^T x_3 = x^T a \tag{15}$$

donde el vector de datos x y el vector de coeficientes viene dado por:

$$\begin{aligned}
x^T &= (x(k), x(k-1), \dots, x(k-N+1), \\
&x^2(k), x(k)x(k-1), \dots, x^2(k-N+1), \\
&x^3(k), \dots, x^3(k-N+1))
\end{aligned} \tag{16}$$

Y

$$a^T = \underbrace{a_0, \dots, a_{N-1}}_{a_1^T} \underbrace{b_{00}, \dots, b_{N-1, N-1}}_{b_2^T} \underbrace{c_{000}, \dots, c_{N-1, N-1, N-1}}_{c_3^T} \tag{17}$$

Los parámetros desconocidos de la serie pueden ser determinados a partir de las medidas de entrada-salida resolviendo la ecuación:

$$y = Xa \quad (18)$$

donde:

$$y = \begin{pmatrix} y(k) \\ y(k-1) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ y(k-N) \end{pmatrix}$$

$$x = \begin{pmatrix} x_1^T(k) & x_2^T(k) & x_3^T(k) \\ x_1^T(k-1) & x_2^T(k-1) & x_3^T(k-1) \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ x_1^T(k-N) & x_2^T(k-N) & x_3^T(k-N) \end{pmatrix}$$

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \quad (19)$$

la solución por mínimos cuadrados viene dada por la ecuación normal $X^T X a = X^T y$ que tiene como solución:

$$\hat{a} = (X^T X)^{-1} X^T y \quad (20)$$

En caso de que no exista la inversa, habría que usar la inversa generalizada de Penrose, o bien replantear el experimento.

Modelos NARMAX Entre los modelos no lineales, uno de los más interesantes, es el modelo NARMAX (Non- linear Auto-Regressive Moving Average with eXogenous inputs), que es una generalización de las series de Volterra y que puede ser descrito como:

$$y(t) = F \left[y(t-1), \dots, y(t-n_y), u(t-d), \dots, u(t-d-n_u+1), \varepsilon(t-1), \dots, \varepsilon(t-n_\varepsilon) \right] + \varepsilon(t) \quad (21)$$

donde t representa el tiempo discreto, $y(t)$, $u(t)$ y $\varepsilon(t)$ son la salida, la entrada, y el error de predicción, respectivamente, n_y , n_u y n_ε son los órdenes correspondientes, $F[\cdot]$ es una función no lineal y d es el mínimo retardo de la entrada [Leontaritis-1985]. El modelo polinomial NARMAX tiene como expresión:

$$y(k) = a_0 + \sum_{i=1}^{n_y} a_i y(k-i) + \sum_{i=1}^{n_u} b_{iu} u(k-i) + \sum_{i=1}^{n_y} \sum_{j=1}^{n_u} c_{ij} y(k-1)u(k-j) + \sum_{i=1}^{n_y} a_i^t y^2(k-i) + \sum_{i=1}^{n_N} b_i^t u^2(k-i) + \sum_{i=1}^{n_\varepsilon} a_i \varepsilon(k-i) \quad (22)$$

Esto permite una descripción buena y sencilla de una amplia clase de sistemas no lineales. Por ejemplo, si el modelo exacto NARMAX es

$$Y(k) = Y(k-1)e^{-u(k-1)} \quad (23)$$

Se puede desarrollar en serie la exponencial

$$\exp(-x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-x)^i}{i!} \quad (24)$$

y emplear un modelo polinomial aproximado NARMAX

$$y(k) = y(k-1) - y(k-1)u(k-1) + \frac{1}{2}y(k-1)u^2(k-1) - \frac{1}{6}y(k-1)u^3(k-1) \quad (25)$$

4.2.5. Modelos No paramétricos, Redes Neuronales.

Los modelos de Redes Neuronales artificiales han sido estudiados durante muchos años con el ánimo de conseguir cánones parecidos a la de los humanos en campos como el reconocimiento del habla o de imágenes³⁸. Estos modelos están compuestos por muchos elementos computacionales trabajando en paralelo y organizados en patrones que recuerdan a las redes neuronales biológicas. Los elementos computacionales o nodos están conectados mediante pesos que son adaptados a lo largo del proceso para mejorar sus cánones. Es imposible cubrir todos los tipos de redes neuronales y solamente se van a considerar las llamadas Feedforward y Recurrentes, que son las más utilizadas en identificación de sistemas.

4.2.5.1. Redes Feedforward

El desarrollo de ecuaciones desde la numero (9), para la cual se tiene el vector de parámetros, de una función en la base $\{g_k\}$ a lo que es una red neuronal no es grande. Basta escoger $g_k(\varphi) = \alpha_k \sigma(\beta_k \varphi + \gamma_k)$ donde β_k es un vector de parámetros y γ_k y α_k son parámetros escalares para obtener:

³⁸ Tomado del libro titulado “Identificación de Sistemas Dinámicos”. Fundamentos y Estado del Arte. Cristian Kunush. Universidad Nacional de la Plata. Facultad de Ingeniería. Departamento de Electrónica. Pág. 8. Año 2003.

$$g(\varphi) = \sum_{k=1}^N \alpha_k \sigma(\beta_k \varphi + \gamma_k) + \alpha_0 \quad (26)$$

donde α_0 es el valor correspondiente al nivel medio. A este modelo se le denomina Red Feedforward con una capa oculta y una salida. Las funciones de la base, llamadas nodos o neuronas, son funciones univaluadas que convierten la red neuronal en un desarrollo en funciones simples. La elección específica de $\sigma(\cdot)$ es denominada función de activación y suele ser escogida igual para todos los nodos. El nombre *feed forward* está explicado por la figura 7; hay una dirección específica en el flujo de los cálculos cuando se calcula la salida g .

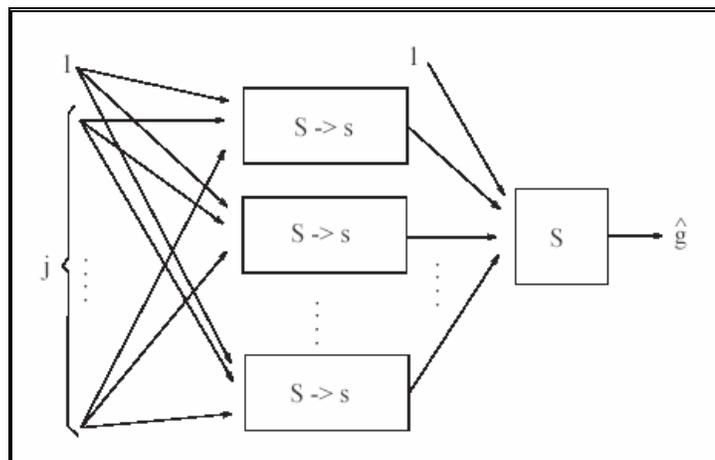


Figura 7. Red feedforward con una capa oculta y una salida.

Primero se calculan las sumas con pesos en la entrada de cada unidad, después estas sumas son pasadas por la función de activación y forman las salidas de las capas ocultas. Para calcular g se forma una suma con pesos de las salidas de los

nodos de la capa oculta. Si g es una función vectorial, hay varios nodos de salida formando la capa de salida. La entrada ϕ a veces se denomina capa de entrada. Los pesos de las diferentes sumas son los parámetros de la red.

La función $\sigma(x)$ se toma de tipo *sigmoide*, es decir es una función continua que verifica $\lim_{x \rightarrow -\infty} \sigma(x) = a$ y $\lim_{x \rightarrow \infty} \sigma(x) = b$ con $a, b \in \mathbb{R}$ y $b < a$. La red neuronal de una capa oculta de la ecuación 25 se puede generalizar a varias capas ocultas. La salida de la primera capa oculta alimenta la segunda capa y así sucesivamente, y la última capa oculta alimenta a la capa de salida, como se puede ver en la figura. La fórmula para dos capas ocultas será

$$g(\phi) = \sum_i \theta_{1,i}^3 \sigma \left(\sum_j \theta_{i,j}^2 \sigma \left(\sum_m \theta_{r,m}^1 \phi_m \right) \right) \quad (27)$$

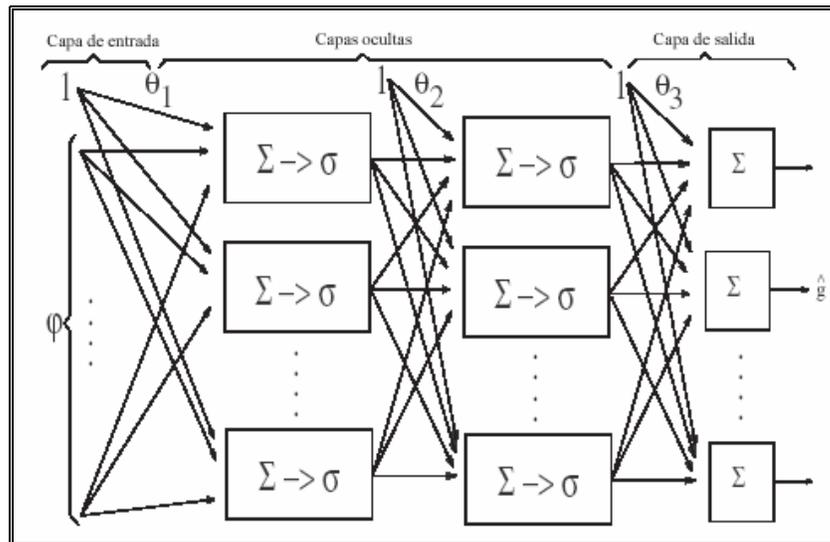


Figura 8. Red feedforward con dos capas ocultas.

4.2.5.2. Redes recurrentes

Si alguna de las entradas de la red *feed forward* consiste en salidas retardadas de la red, o bien en algún estado interno retardado, la red recibe el nombre de red recurrente o red dinámica. Éste tipo de redes son ideales para identificación.

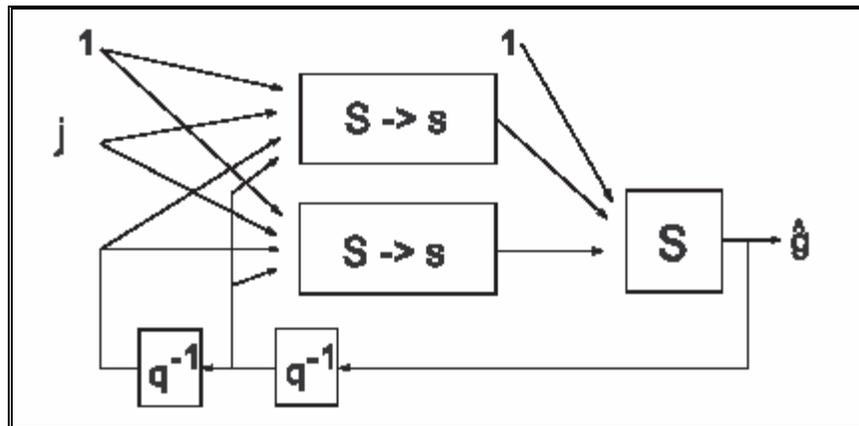


Figura 9. Red Recurrente. q^{-1} retarda la señal un tiempo de muestreo

4.2.5.3. Aspectos Algorítmicos

Los pesos de la red deben ser escogidos de forma que la salida se ajuste lo mejor posible a los datos observados, para ello hay que minimizar el funcional:

$$V_N(\theta) = \frac{1}{2N} \sum_{t=1}^N |y(t) - g(\phi(t), \theta)|^2 \quad (28)$$

Como no hay solución analítica a este problema, es necesario emplear algún método numérico de optimización. Las rutinas de búsqueda más eficientes están

basadas en búsqueda local para una dirección de mayor pendiente desde el punto actual. Por lo tanto, se tiene un esquema iterativo del tipo

$$\hat{\theta}^{(i+1)} = \hat{\theta}^{(i)} - \mu_i R_i^{-1} \nabla \hat{g}_i \quad (29)$$

donde μ_i es el paso, $\nabla \hat{g}_i$ es una estimación del gradiente $\nabla_N \hat{\theta}^{(i)}$ y R_i es una matriz que modifica la dirección de búsqueda.

4.2.5.4. Identificación con redes neuronales

Los dos esquemas tradicionales de identificación para sistemas dinámicos, llamados serie-paralelo y paralelo, son los representados en las figuras 10 y 11, respectivamente.

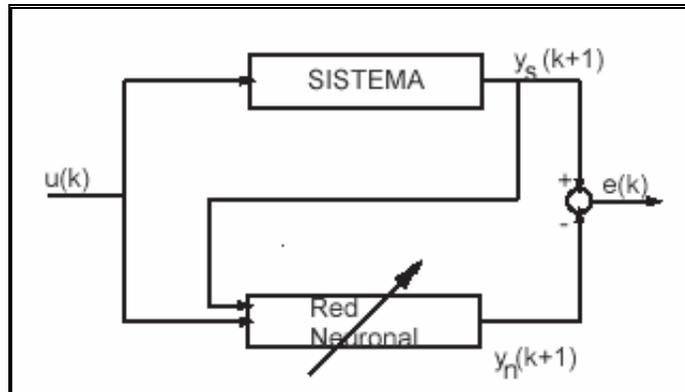


Figura 10. Identificación Serie – Paralelo

El esquema de identificación serie-paralelo utiliza las entradas y salidas de la planta y deja que internamente la red deduzca el error existente. Este esquema, también llamado *teacher forcing* puede ser usado con cualquier algoritmo de aprendizaje. La idea es que durante la fase de entrenamiento, para calcular los nuevos

estados de la red neuronal, se utilicen en el lazo de realimentación las salidas actuales de la planta en lugar de las salidas de la red. Su implementación puede ser muy sencilla con cualquier algoritmo.

La serie-paralelo es útil al inicio del aprendizaje para que los valores de la red no se alejen mucho y converja más rápido. En el esquema de identificación paralela, la red no tiene información directa acerca de las salidas de la planta, sólo las entradas y el error entre las salidas de la planta y la red.

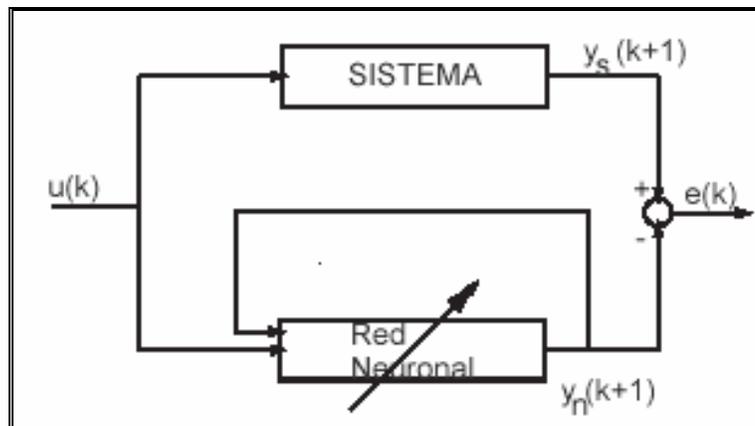


Figura 11. Identificación paralela.

Redes neuronales con paralelización del tiempo. La representación del tiempo y su influencia en el comportamiento de los sistemas es uno de los problemas más difíciles en las aplicaciones de modelado y control.

Una forma de representar eventos temporales es su representación directa como una dimensión explícita en un vector del espacio de entrada. El primer elemento

representa el primer evento temporal, el segundo elemento de cada vector representa el segundo evento temporal y así sucesivamente.

La representación del tiempo en las redes neuronales utilizadas en aplicaciones de sistemas dinámicos se puede clasificar en dos grupos de métodos distintos. El primer grupo tiende a diseñar su propia arquitectura de red dinámica en aplicaciones específicas. El segundo grupo lo forman las modificaciones a las estructuras y a los algoritmos de aprendizaje estático, para incluir en ellos de manera explícita el nuevo parámetro tiempo y así poder representar la dinámica del sistema. Los retardos pueden ser introducidos en la capa de entrada o en las capas internas. Ejemplos de estas arquitecturas son:

Time Delay Neural Networks (TDNN):

Hopfield y Tank [20] (1986), Toma de decisiones y Optimización.

Guyon y Albrecht [21] (1990), Reconocimiento de caracteres escritos a mano.

Redes Neuronales Recurrentes:

Rumelhart, Hinton y Williams [22] (1986), Completar secuencias.

Williams y Zipser (1989), Reconocimiento de caracteres.

Robinson y Fallside (1988), Reconocimiento de voz.

Memory Neuron Networks :

Poddar [23] (1991): Reconocimiento de caracteres.

El segundo grupo está formado por las modificaciones a las estructuras y a los algoritmos de aprendizaje estáticos para incluir en ellos el tiempo. Una de las más conocidas es la red de la figura 12 que fue propuesta por Elman (1990). En ella se aprecia que la capa de entrada está dividida en dos partes; el conjunto de entradas externas y una copia de la activación de la capa oculta en el instante anterior.

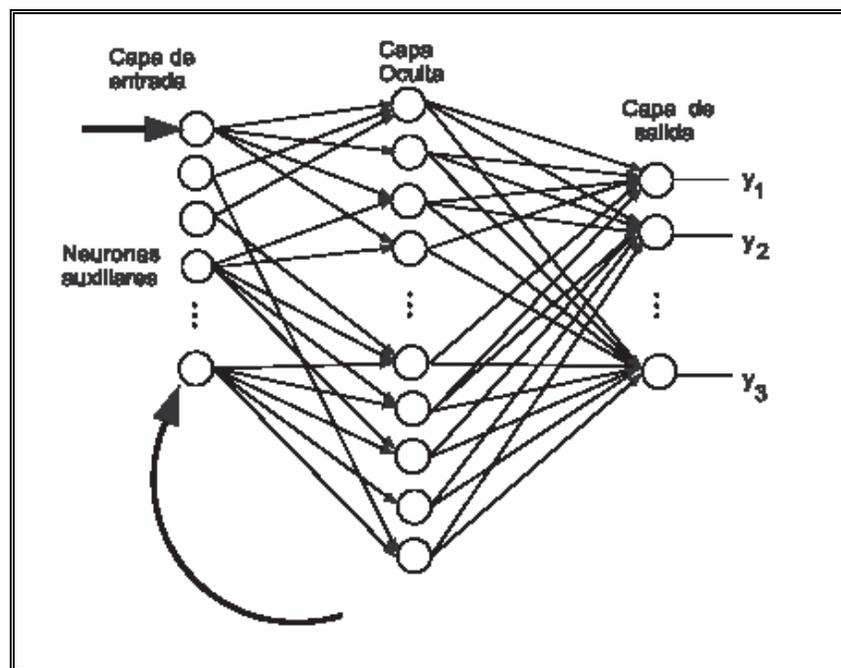


Figura 12. Red con realimentación de la Capa Oculta.

La red es de propagación hacia adelante y al ajustar los pesos hay que tener en cuenta los pesos que van desde las entradas auxiliares a la capa oculta. Este tipo de red puede reconocer o reproducir secuencias de periodos cortos de tiempo. Este tipo de red se utilizó para el reconocimiento de palabras generadas por una gramática formal. Jordan propuso una arquitectura figura 13 donde la capa de en-

trada está dividida en dos partes: el conjunto de entradas externas y la realimentación de la activación de la capa de salida a través de conexiones de valor fijo.

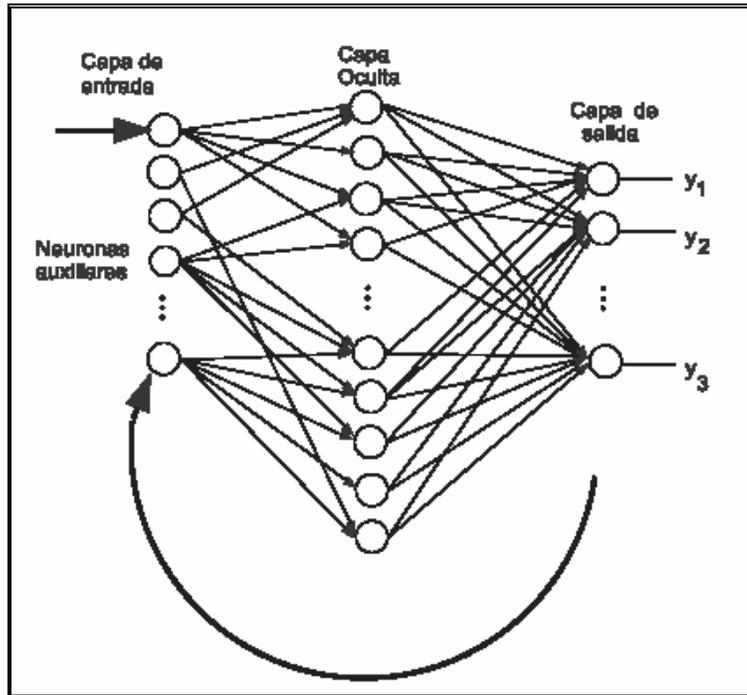


Figura 13. Red con realimentación de la Capa de Salida.

Este tipo de red es utilizada para el reconocimiento y clasificación de secuencias. Fue sugerida por Jordan para su empleo en la generación de trayectorias de robots. Ejemplos de otras arquitecturas dentro de éste grupo son:

Backpropagation in Dynamic Systems (BPD):

[Narendra [24] (1991)]: Identificación y Control, Control por Modelo de Referencia. Propone la construcción de una segunda red llamada 'sensitivity model' para el

cálculo en línea de las derivadas de las salidas con respecto a los parámetros (matriz Jacobiana) y de las derivadas con respecto a las entradas. En el artículo, por lo demás explica con detalle el esquema propuesto para generar el gradiente.

Backpropagation through time (BTT):

[Werbos [25] (1990)]: Identificación, Camión remolque.

El fundamento consiste en permitir a la red observar lo que ocurrirá con el sistema durante un tiempo T de pasos futuros, para que pueda adaptar sus pesos en consecuencia. Debido a la duplicación de unidades, los pesos y el costo computacional del entrenamiento, hacen que esta arquitectura no sea muy popular³⁹.

4.2.6. Identificación en Bucle Cerrado.

La Identificación para el Control ha tenido notable interés en los últimos años ver, por ejemplo, los artículos de Gevers [26], Lee [27], Van den Hof [28] y la tesis de Forssell [29]). El objetivo es encontrar modelos válidos para un control adaptativo. El uso de experimentos en bucle cerrado (figura 14), es una de las características de estos métodos. Otra de las razones para su utilización puede ser la inestabilidad de la planta.

³⁹ Tomado del libro titulado “Identificación de Sistemas Dinámicos”. Fundamentos y Estado del Ate. Cristian Kunush. Universidad Nacional de la Plata. Facultad de Ingeniería. Departamento de Electrónica. Pág. 15. Año 2003.

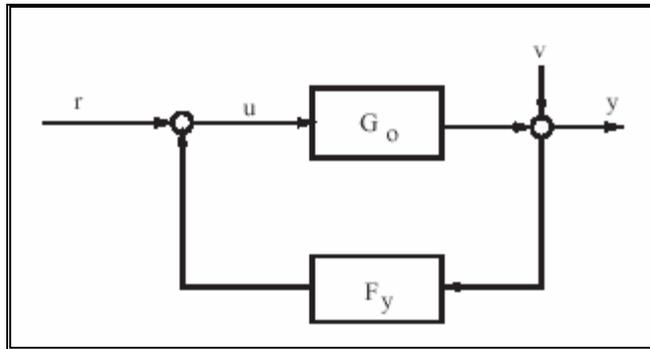


Figura 14. Sistema en bucle cerrado

La finalidad de la identificación en Bucle Cerrado es obtener buenos modelos del sistema en bucle abierto, a pesar de la realimentación. Varios métodos que dan estimaciones consistentes para datos en bucle abierto pueden fallar cuando se aplican de manera directa a la identificación en bucle cerrado. Estos incluyen los análisis espectral y de correlación, el método de la variable instrumental, los métodos de subespacios y los OE (output error) con modelo de ruido incorrecto (ver la tesis de Forssell [29] y el artículo de Forssell y Ljung [30]). Se considera el sistema

$$Y(k) = G_o(q)u(t) + H_o(q)e(t) \quad (30)$$

con $e(t)$ ruido blanco de varianza λ_0 y el regulador es

$$u(t) = r(t) - F_y(q)y(t). \quad (31)$$

El sistema en bucle cerrado puede ser

$$Y(t) = G_o(q)S_o(q)r(t) + S_o(q)H_o(q)e(t) \quad (32)$$

Donde $S_o(q)$ es la función de sensibilidad,

$$S_o(q) = \frac{1}{1 + F_y(q)G_o(q)} \quad (33)$$

Es importante conocer que el método de error de predicción puede ser aplicado directamente, como si la realimentación no existiera, y el resultado dará una precisión aceptable si el sistema verdadero puede ser descrito dentro de la estructura de modelo escogida. Sin embargo, debido a las trampas que puede traer la identificación en bucle cerrado, han sido sugeridos diversos métodos alternativos. Se pueden clasificar en (ver el artículo de Gustafsson [31]):

- *Procedimiento Directo*: Se aplica el método de error de predicción y se identifica el sistema en bucle abierto usando medidas de la entrada y la salida.
- *Procedimiento Indirecto*: Se identifica el sistema en bucle cerrado utilizando medidas de la señal de referencia r y de la salida y y se usa esta estimación para hallar los parámetros del sistema en bucle abierto utilizando el conocimiento del controlador.
- *Procedimiento de Entrada-Salida conjuntas*: Se identifican las funciones de transferencia de r a y y de r a u y se utilizan para hallar una estimación del sistema en bucle abierto.

$$\begin{aligned}
 Y(t) &= G_o(q)S_o(q)r(t) + S_o(q)H_o(q)e(t) \\
 u(t) &= S_o(r(t)) - F_y(q)S_o(q)H_o(q)e(t)
 \end{aligned}
 \tag{34}$$

El procedimiento de Identificación Directa es el método más natural para hacer identificación en bucle cerrado. Las principales razones son:

-  Funciona bien a pesar de la complejidad del regulador y no requiere conocimiento de la realimentación.

-  No se necesitan algoritmos ni software especiales. Se asegura la consistencia y la precisión óptima siempre que la estructura del modelo contenga al sistema verdadero.

Los problemas que plantea éste procedimiento son:

-  Es necesario tener buenos modelos del ruido (ver teorema 8.4 en el libro de Ljung [14]).

-  Un pre-filtro/modelo de ruido que cambie las características del ruido verdadero produce sesgo.

El problema básico de los datos en bucle cerrado es que contienen menos información que cuando se toman los datos en bucle abierto, puesto que un importante

propósito de la realimentación es hacer al sistema en bucle cerrado insensible a los cambios del sistema en bucle abierto. Los métodos de error de predicción, aplicados de una manera directa, con modelo de ruido que puede describir las propiedades del ruido verdadero dan estimaciones consistentes y precisión óptima. Además no se necesita conocimiento de la realimentación. Por esto deben ser vistos como los métodos de primera elección.

4.3. ESTIMACIÓN DE ESTADOS

Cuando el estado de un sistema tiene que ser estimado a partir de información sensorial con ruido, se necesita emplear algún tipo de estimador de estados para fusionar los datos de los diferentes sensores y producir una estimación precisa del verdadero estado del sistema. Si la dinámica del sistema y el modelo de observación son lineales, entonces el estimador de mínimos cuadrados puede ser calculado usando el *filtro de Kalman*⁴⁰.

4.3.1. Modelos en el espacio de estados.

Un sistema dinámico puede ser también descrito por un modelo en el espacio de estados. El modelo en el espacio de estados de orden n de múltiples entradas y múltiples salidas (MIMO), no-lineal e invariante en el tiempo tiene la forma:

⁴⁰ Tomado del libro titulado "Identificación de Sistemas Dinámicos". Estimación de estados. Cristian Kunush. Universidad Nacional de la Plata. Facultad de Ingeniería. Departamento de Electrónica. Pág. 18. Año 2003.

$$\begin{cases} x(k+1) = \phi(x(k), u(k)) \\ y(k) = \psi(x(k)) \end{cases} \quad (35)$$

Donde

$$\begin{cases} x(k) = (x_1(k), x_2(k), \dots, x_n(k))^T \\ u(k) = (u_1(k), u_2(k), \dots, u_m(k))^T \\ y(k) = (y_1(k), y_2(k), \dots, y_l(k))^T \end{cases} \quad (36)$$

$x(k)$, $u(k)$, e $y(k)$ son el vector de estados, el vector de entradas y el vector de salidas, respectivamente. Si el sistema es lineal,

$$\begin{cases} x(k+1) = Ax(k) + Bu(k) \\ y(k) = Cx(k) + Du(k) \end{cases} \quad (37)$$

donde A , B , C y D son matrices $(n \times n)$, $(m \times n)$, $(n \times l)$ y $(m \times l)$ respectivamente. Estas estructuras sirven para modelar tanto sistemas lineales como no-lineales.

4.3.2. La estimación lineal en sistemas dinámicos – El filtro de Kalman.

El problema de estimación dinámica. Considerando un sistema dinámico lineal en tiempo discreto descrito por una ecuación vectorial en diferencias con ruido blanco Gaussiano aditivo que modela “perturbaciones no predecibles”. La ecuación de estado es

$$x(k+1) = F(k)x(k) + G(k)u(k) + v(k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (38)$$

donde $x(k)$ es el vector de estado de dimensión n_x , $u(k)$ es el vector de entrada de dimensión n_u (que es conocido), y $v(k)$, $k = 0, 1, \dots$, es la secuencia de ruido blanco Gaussiano de media cero con covarianza

$$E[v(k)v(k)'] = Q(k) \quad (39)$$

La ecuación de medida es:

$$z(k) = H(k)x(k) + w(k), \quad k = 1, 2, \dots \quad (40)$$

con $w(k)$ secuencia de ruido de medida blanco Gaussiano de media cero con covarianza

$$E[w(k)w(k)'] = R(k) \quad (41)$$

Las matrices F , G , H , Q , y R se suponen conocidas y que pueden cambiar con el tiempo. En otras palabras, el sistema puede cambiar con el tiempo y los ruidos son no estacionarios. El estado inicial $x(0)$ es en general desconocido y se modela como una variable aleatoria Gaussiana con media y covarianza conocidas. Las dos secuencias de ruido y el estado inicial se suponen mutuamente independientes. Las anteriores condiciones se llaman lineales-Gaussianas.

El algoritmo de estimación. El algoritmo de estimación comienza con una estimación inicial $\hat{x}\langle 0|0\rangle$ de $x(0)$ y la covarianza asociada $P\langle 0|0\rangle$, que se supone disponible. Un ciclo del algoritmo de estimación dinámica (filtro de Kalman) consiste en estimar a partir

$$\hat{x}(k|k) = E[x(k)|Z^k] \quad (42)$$

que es la medida condicional del estado en el tiempo k . Dadas las observaciones hasta el tiempo k inclusive, y de la matriz de covarianza asociada.

$$P(k|k) = E[(x(k) - \hat{x}(k|k))(x(k) - \hat{x}(k|k))' | Z^k] \quad (43)$$

las correspondientes variables del siguiente paso, $\hat{x}(k+1|k+1)$ y $P(k+1|k+1)$. Esto se puede hacer puesto que las variables Gaussianas quedan caracterizadas por sus dos primeros momentos.

4.3.3. El caso no lineal: Filtros No-lineales.

En el caso no lineal el problema de filtrado en el espacio de estados viene dado por

$$x(k) = g(k, x(k-1), \varepsilon(k)), \quad (44)$$

$$z(k) = h(k, x(k), \eta(k)), \quad (45)$$

donde $\varepsilon(k)$ y $\eta(k)$ son los ruidos, que se suponen vectores aleatorios, independientemente distribuidos:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon(k) \\ \eta(k) \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} (0) \\ (0) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} Q(k) & 0 \\ 0 & R(k) \end{pmatrix} \quad (46)$$

La estimación óptima implica la descripción de la densidad de probabilidad condicional

$$\hat{x}^{MMSE}(k|k) = E(x(k)|Z^k) = \int x(k) p(x(k)|Z^k) dx \quad (47)$$

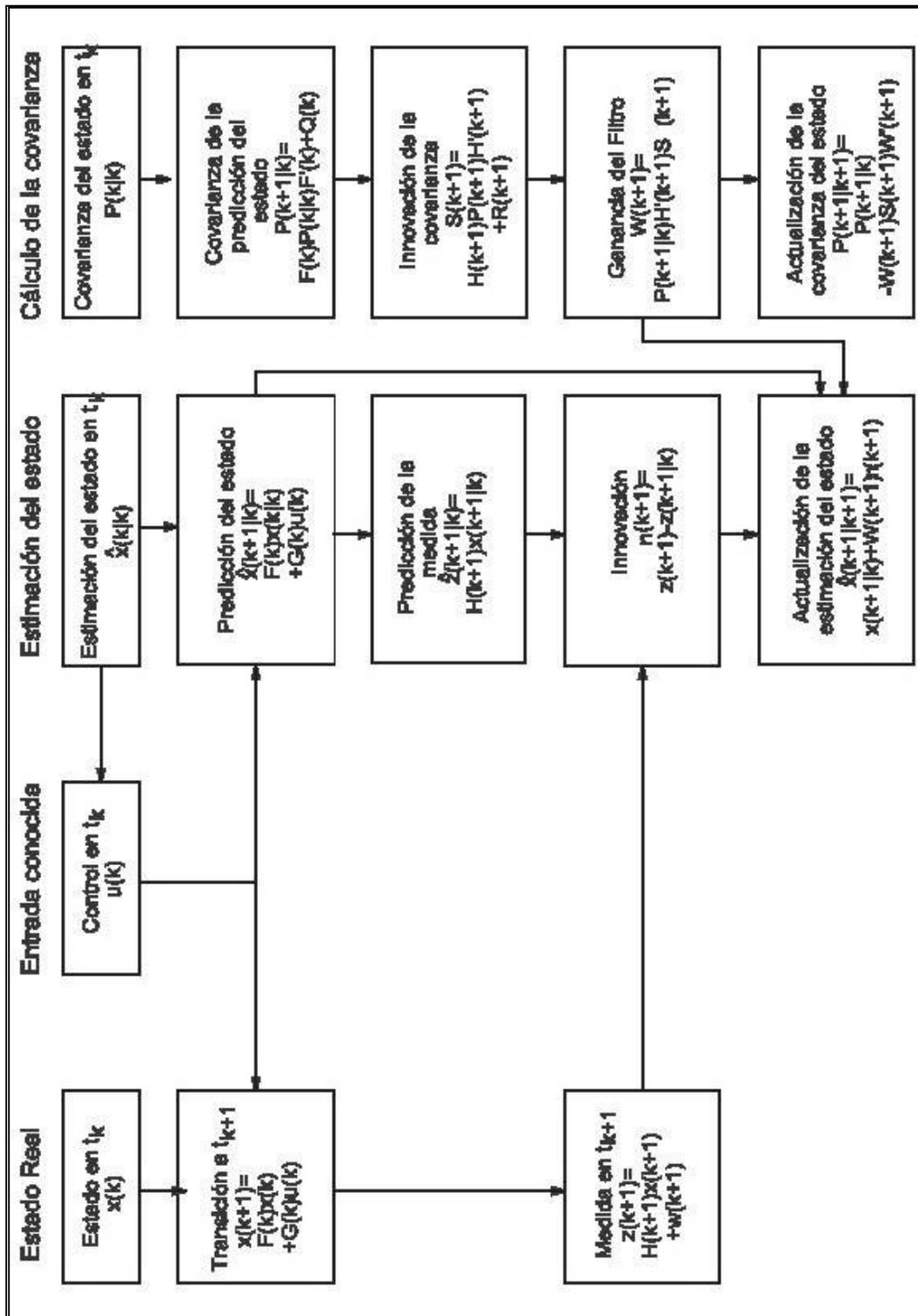


Figura 15. Diagrama de flujo del filtro de Kalman

Desafortunadamente, esta descripción necesita un número infinito de parámetros. Por esta razón, se han propuesto un número importante de aproximaciones sub-óptimas. Estos métodos utilizan aproximaciones analíticas de las distribuciones de probabilidad, la ecuación de transición de estados o la ecuación de medida. Existen otros métodos, tales como el método de Montecarlo, que necesitan miles de puntos para aproximar la densidad de probabilidad condicional. En aplicaciones con muchas dimensiones, estos últimos métodos no son prácticos. Por esta razón son necesarios métodos con un número razonable de operaciones.

4.3.4. Filtro extendido de Kalman (EKF) y Filtro No-Lineal de Segundo Orden (SNF).

El filtro Extendido de Kalman es similar a un filtro de Kalman linealizado, con la excepción de que la linealización es realizada en la trayectoria estimada en vez de hacerlo en una trayectoria nominal previamente calculada. Por esta razón, las funciones $g(k, x(k-1), \varepsilon(k))$ y $h(k, x(k), \eta(k))$ son desarrolladas en serie de Taylor alrededor de $\hat{x}\langle k|k \rangle$ con términos hasta primer o segundo orden para obtener el EKF o SNF respectivamente. El desarrollo con términos de segundo orden de la ecuación de transición es:

$$\begin{aligned}
x(k) &= q(k, x(k-1), \varepsilon(k)) \cong g(k, \hat{x}(k|k-1), 0) + g_x(k, x(k-1), \varepsilon(k))(x(k-1) - \hat{x}(k-1|k-1)) \\
&+ g_\varepsilon(k, x(k-1), \varepsilon(k))\varepsilon(k) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n e_j (x(k-1) - \hat{x}(k-1|k-1))' g_{xx}^j(k, x(k-1), \varepsilon(k))(x(k-1) - \hat{x}(k-1|k-1)) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n e_j \varepsilon'(k) g_{\varepsilon\varepsilon}^j(k, x(k-1), \varepsilon(k))\varepsilon(k) + \sum_{j=1}^n e_j (x(k-1) - \hat{x}(k-1|k-1))' g_{x\varepsilon}^j(k, x(k-1), \varepsilon(k))\varepsilon(k)
\end{aligned}$$

(48)

y el desarrollo con términos hasta segundo orden de la ecuación de medida es:

$$\begin{aligned}
z(k) &= h(k, x(k), \eta(k)) \cong h(k, \hat{x}(k|k-1), 0) \\
&+ h_x(k, x(k-1), \eta(k))(x(k-1) - \hat{x}(k-1|k-1)) + h_\eta(k, x(k-1), \eta(k))\eta(k) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n e_j (x(k-1) - \hat{x}(k-1|k-1))' h_{xx}^j(k, x(k-1), \eta(k))(x(k-1) - \hat{x}(k-1|k-1)) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n e_j \eta'(k) h_{\eta\eta}^j(k, x(k-1), \eta(k))\eta(k) \\
&+ \sum_{j=1}^n e_j (x(k-1) - \hat{x}(k-1|k-1))' h_{x\eta}^j(k, x(k-1), \eta(k))\eta(k)
\end{aligned}$$

(49)

donde e_j es el j^{th} vector de la base Cartesiana.

4.3.5. Filtro extendido iterado de Kalman (IEKF).

La predicción de la medida, hasta primer orden, es $\hat{z}\langle k|k-1\rangle = h(k, \hat{x}\langle k|k-1\rangle)$. Hay errores en predicción en usar $\hat{x}\langle k|k-1\rangle$ para $x(k)$. Otros errores adicionales son debidos a la no linealidad en la medida. Es posible disminuir estos errores si el estado actualizado no es calculado como una aproximación a la esperanza condicional sino como un estimador del tipo maximum a posteriori. La función de densidad de probabilidad condicional, PDF, de $x(k)$ dado Z_k , si todas las variables aleatorias son Gaussianas, es

$$\begin{aligned}
p(x(k)|Z^k) &= p(x(k)|z(k), Z^{k-1}) \\
&= \frac{1}{c} p(z(k)|x(k)) p(x(k)|Z^{k-1}) \\
&= \frac{1}{c} N(z(k); h(k, x(k)), R(k)) N(x(k); \hat{x}(k|k-1), P(k|k-1))
\end{aligned}
\tag{50}$$

Maximizar esta función es equivalente a minimizar la siguiente

$$\begin{aligned}
V(x(k)) &= \frac{1}{2} (z(k) - h(k, x(k)))' R(k)^{-1} (z(k) - h(k, x(k))) \\
&\quad + \frac{1}{2} (x(k) - \hat{x}(k|k-1))' (P(k|k-1))^{-1} (x(k) - \hat{x}(k|k-1))
\end{aligned}
\tag{51}$$

El filtro de Kalman Extendido Iterado (IEKF) usa un algoritmo Newton-Raphson para estimar $\hat{x}(k|k)$. Desarrollando V en serie de Taylor hasta segundo orden alrededor de la i -ésima iteración de $x(k)$ da como resultado.

$$V = V^i + V_x^i (x - x^i) + \frac{1}{2} (x - x^i)' V_{xx}^i (x - x^i) \tag{52}$$

Poniendo el gradiente a cero

$$X^{i+1} = X^i - (V_{xx}^i)^{-1} V_x^i \tag{53}$$

Esto da lugar a la ecuación IEKF

$$\hat{x}(k|k) = \hat{x}^{i-1}(k|k) + P^{i-1}(k|k)H^{i-1}(k)'R(k)^{-1} \left\{ z(k) - h(k, \hat{x}^{i-1}(k|k)) \right\} \\ - P^{i-1}(k|k)P(k|k-1)^{-1}(\hat{x}^i(k|k) - \hat{x}(k|k-1)) \quad \text{con } H^{i-1}(k) = h_x(k, \hat{x}^i(k|k))$$

(54)

4.4. VALIDACIÓN DE MODELOS

Después de la estimación, la pregunta obvia es si el modelo que se ha derivado es adecuado para el uso que se le pretende dar. Éste es el difícil y subjetivo problema de la validación. De acuerdo con Bohlin la mejor manera de atacar el problema es confrontar al modelo con todas las fuentes de información disponibles, incluyendo el conocimiento previo, los datos experimentales y la experiencia usando el modelo. Para tener más confianza en el modelo el consejo general es emplear tantas herramientas de validación como sea posible⁴¹.

La primera forma concebible es el uso del sentido común. Si, por ejemplo, un parámetro estimado representa la longitud de un eje, ésta debe ser positiva. Otro ejemplo puede ser el nivel de un depósito. Los tests de éste tipo pertenecen a la categoría del conocimiento previo y son especialmente importantes cuando los

⁴¹ Tomado del libro titulado “Identificación de Sistemas Dinámicos”. Validación de Modelos. Cristian Kunush. Universidad Nacional de la Plata. Facultad de Ingeniería. Departamento de Electrónica. Pág. 23. Año 2003.

parámetros tienen algún significado físico. La gran mayoría de los métodos están basados en datos experimentales. Un test básico consiste en calcular la varianza de los parámetros estimados. Una varianza grande comparada con el valor del parámetro indica que algo está mal. Otra posibilidad es estimar varios modelos en paralelo. La respuesta en frecuencia del modelo paramétrico puede ser comparada con la respuesta espectral, por ejemplo. La herramienta de validación más versátil, en todas las categorías, es la simulación. El sistema verdadero y el sistema derivado se alimentan con la misma señal de entrada y se comparan las salidas. Para una buena comparación es deseable que el experimento se base en datos nuevos, es decir que no se hayan utilizado para la estimación. Esto recibe el nombre de validación cruzada.

También es aconsejable investigar la secuencia de residuos $\{\varepsilon(\hat{\theta}_N)\}$, especialmente con datos nuevos. Una manera muy sencilla es representar gráficamente estos residuos y comprobar si la secuencia resultante muestra el patrón de ruidos esperado. Conjuntamente con esto, para saber si los residuos son más o menos blancos, puede ser estudiada su covarianza muestral

$$R_N^\varepsilon(\tau) = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-\tau} \varepsilon(t, \hat{\theta}_N) \varepsilon(t + \tau, \hat{\theta}_N) \quad (55)$$

que para $\tau > 0$ debe ser pequeño, al menos si N es grande. Además la independencia entre la entrada y la salida puede ser comprobada representando

$$R_N^{\varepsilon, u}(\tau) = \frac{1}{N} \sum_{t=\max(1, 1-\tau)}^{\min(N, N-\tau)} \varepsilon(t, \hat{\theta}_N) u(t + \tau) \quad (56)$$

para varios retardos τ . Éstos deben ser también pequeños, puesto que de lo contrario, hay más información en la salida del sistema real, originada por la entrada. Lo que significa que todavía existen dinámicas no modeladas.

4.4.1. Control adaptativo.

Los problemas de control en los sistemas no-lineales han sido extensivamente estudiados en el pasado. No obstante, existe un gran interés en la comprensión de la conducta de los sistemas no-lineales en cuanto a la modelización e identificación de la estructura y de los parámetros de tales sistemas cuando se diseña un controlador adaptativo. La figura 16 muestra un sistema típico para identificación de modelos (MIAS).

El Control adaptativo controla la salida de la planta en presencia de incertidumbres paramétricas o estructurales. En el control adaptativo tradicional, para conseguir que un problema fuera tratable, la planta se suponía lineal con parámetros desconocidos. Se escogía una estructura de controlador, y los parámetros se ajustaban escogiendo una ley adaptativa, de modo que la salida de la planta siguiera a la referencia asintóticamente. La figura 17 muestra un sistema adaptativo con modelo de referencia (MRAS).

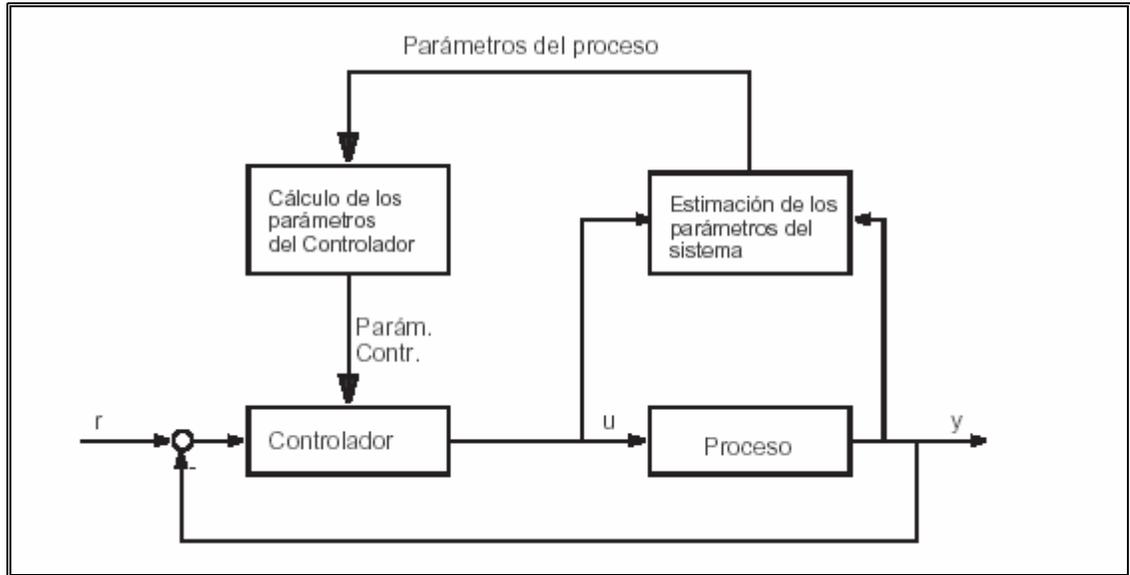


Figura 16. Sistema adaptativo con identificación de modelos (MIAS)

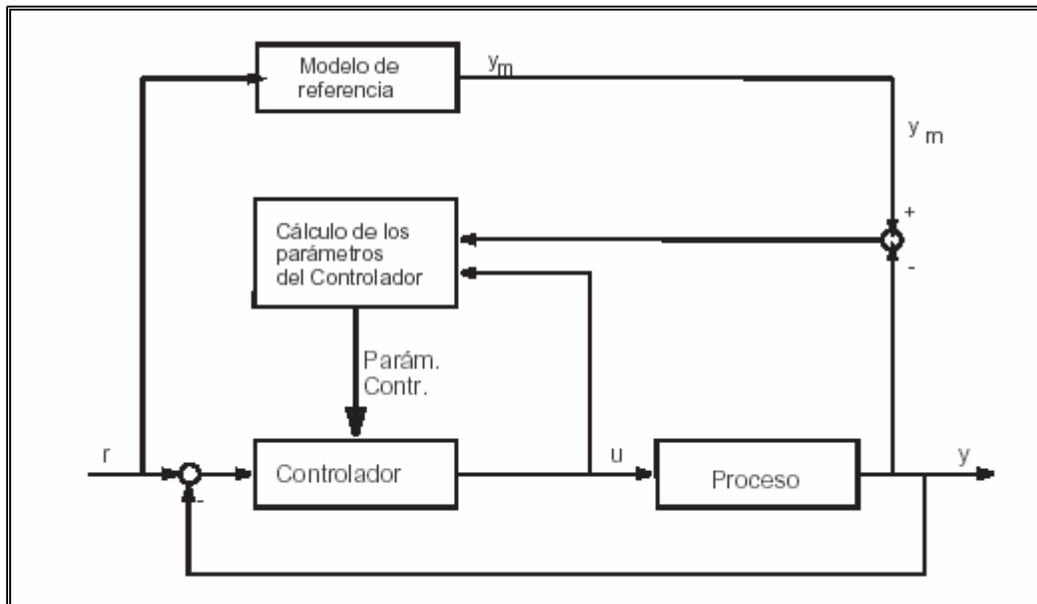


Figura 17. Sistema adaptativo con modelo de referencia (MRAS)

Desde el principio de la tecnología de control adaptativo, se han propuesto dos clases distintas de controladores adaptativos. En el indirecto, los parámetros de la planta se estiman y se ajustan en base a los datos de entrada-salida. En el directo, los parámetros del controlador se ajustan directamente en base a los datos de entrada -salida.

Existen una gran variedad de esquemas adaptativos dentro de estas dos clases, tales como el Model Reference Adaptive Control (MRAC), Self-Tuning Adaptive Control (STAC), Self-Organizing Fuzzy Logic (SOFLIC), Neural Networks (NN), y Neurofuzzy Adaptive Control (NAC). Para los procesos cuyos parámetros varían lentamente en el tiempo, los controladores adaptativos con realimentación pueden ser divididos en dos grandes grupos. Los sistemas adaptativos con identificación de modelo (MIAS) determinan un modelo del proceso las medidas de entrada-salida y métodos de identificación. Aquí los parámetros son calculados de acuerdo con el método de diseño del controlador que ha sido programado con anterioridad. Esta clase de reguladores adaptativos también es denominada 'self tuning regulators'. Los sistemas adaptativos con modelo de referencia (MRAS) que se muestra en la figura 17 intentan obtener una respuesta en bucle cerrado próxima a la dada por el modelo de referencia para la señal de entrada. Aquí una señal externa, por ejemplo la variable de referencia, es medida y la diferencia entre las señales se forma usando las señales del bucle de control y del modelo de referencia y cambiando los parámetros del controlador por medio de un método adaptativo.

5. EXPOSICIÓN SOBRE LAS TÉCNICAS MÁS USADAS EN EL MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS CON REACTORES TANQUE AGITADO

Tomando como guía algunas de las referencias descritas brevemente en el segundo capítulo, a continuación se describen con mayor amplitud la aplicación de estas técnicas en el modelamiento del reactor tanque agitado.

En el artículo *Application of the grey-box approach to parameter estimation in physicochemical models* [1] inicialmente se muestran las ventajas y desventajas de los modelos de estimación de parámetros basados en la obtención de datos experimentales, entre ellas, lo complejo de las soluciones y los aspectos estocásticos que no pueden ser acomodados fácilmente en los rigurosos modelos, sin complicadas soluciones numéricas de el método de estimación de parámetros asociados. Este modelo es comparado con los modelos estadísticos que manejan postulados de modelamiento espectral más sencillos. Son conocidos como modelos de “caja negra”. Una de las desventajas es su relación implícita con la realidad física. Los modelos de identificación de este tipo pueden ser inconsistentes con la realidad cuando se aplican bajo condiciones difíciles (en pequeña escala, el ruido). Aspectos bien conocidos del proceso, como la inestabilidad y la respuesta característica a la función paso, no son reflejados por el modelo identificado de “caja ne-

gra”. La característica esencial y la limitación potencial es que la estructura del modelo es de tipo regresión; además, no permite una interpretación física directa. Puede darse el caso que la aproximación estadística no identifique un modelo físico en forma consistente, y el proceso presente inestabilidad debido a ruidos en pequeña escala o a una estructura del modelo inadecuado. La desventaja de estos métodos son metafóricamente reproducidos en la figura 18.

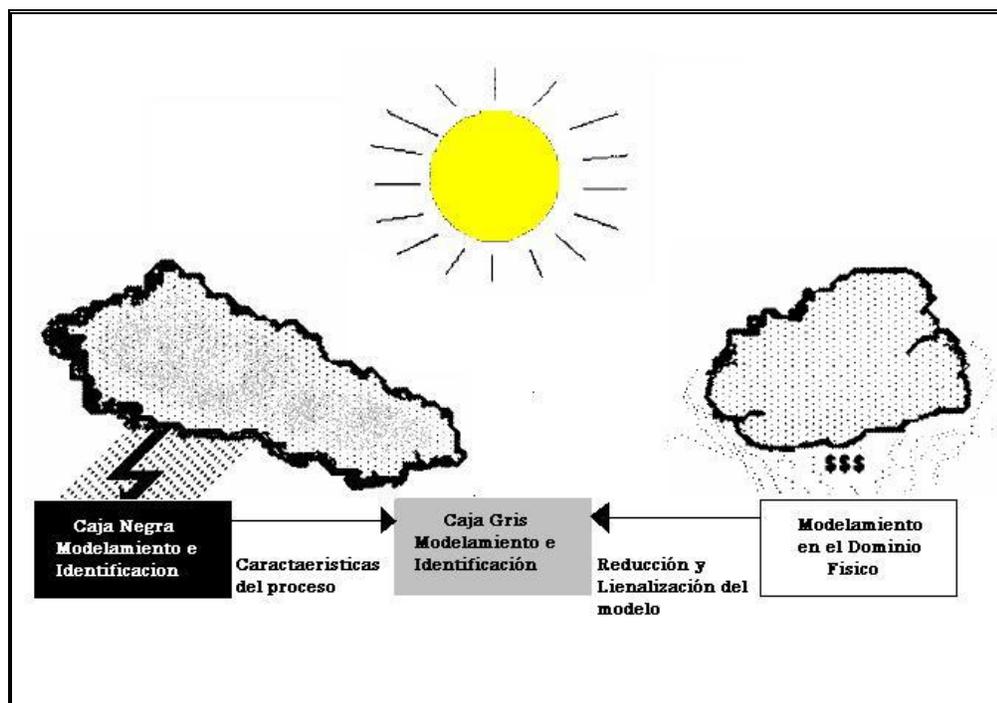


Figura 18. Intención de complementar los modelos.

En el lado derecho, se muestra la identificación en el dominio del modelamiento físico. Este procedimiento es atractivo y muestra los métodos generales para los modelos rigurosos y estimación de parámetros pero, hay que pagar un precio considerable (indicado con los signos de pesos) para evaporar los obstáculos que impiden que “el sol brille”, por ejemplo, completar la estimación de parámetros satis-

factoriamente. Nótese que en general, no requiere un modelo detallado y elaborado para el diseño del controlador. En el lado izquierdo de la figura 18, se trabaja en el dominio del modelamiento estadístico de “caja negra” y sus métodos de identificación. Para muchos propósitos, llama la atención por ser una fácil alternativa de modelamiento, por ejemplo, en el control de procesos y el análisis en el tiempo. Sin embargo, cuando es aplicado en el proceso industrial, puede sufrir de “mal tiempo”, el ruido es una causa importante de muchas inconsistencias. Estos dilemas hacen que se sinteticen las dos ideas en una “caja gris”, en una interfase, trabajando inicialmente con modelos estadísticos e incorporando los elementos más importantes del modelamiento físico. A pesar de todo, esto no resuelve todos los problemas, simbolizado en la figura 18 por el cielo “parcialmente nublado” en el dominio de GB M&I⁴². Para el modelamiento del reactor se considera como una alternativa en la estimación de parámetros físicos convencionales por el método de la “caja gris” en el tiempo discreto, en la estimación de los parámetros cinéticos y termodinámicos que ocurren en el modelamiento de una sencilla reacción química de la forma $S+A=B$, donde B es el producto de la reacción entre A y S. Se asume que ocurre en un CSTR ideal como el mostrado en la figura 19 con una concentración uniforme de A y S y operando bajo condiciones de carga con un flujo volumétrico de salida y de entrada. La temperatura y el volumen se consideran constantes todo el tiempo, asumiendo un control de temperatura y de nivel perfecto. La idea principal es simplificar la estructura del modelo (por medio del tiempo discreto, y si es necesario, la transformación) para aproximarlos a la forma familiar

⁴² GB M&I: Grey Box Modeling and Identification Methods

de la “caja negra”. De igual forma, las características más relevantes del proceso son transformadas para adaptarlas al modelo de la “caja gris”. Así, se logra una estimación de parámetros transparente. Además, otros componentes estocásticos (Ej.: ruidos del sistema) pueden ser manejados con relativa facilidad, siempre que los modelos dinámicos sean importantes para el control avanzado de procesos. Es esencial que estos sean físicamente consistentes y precisos.

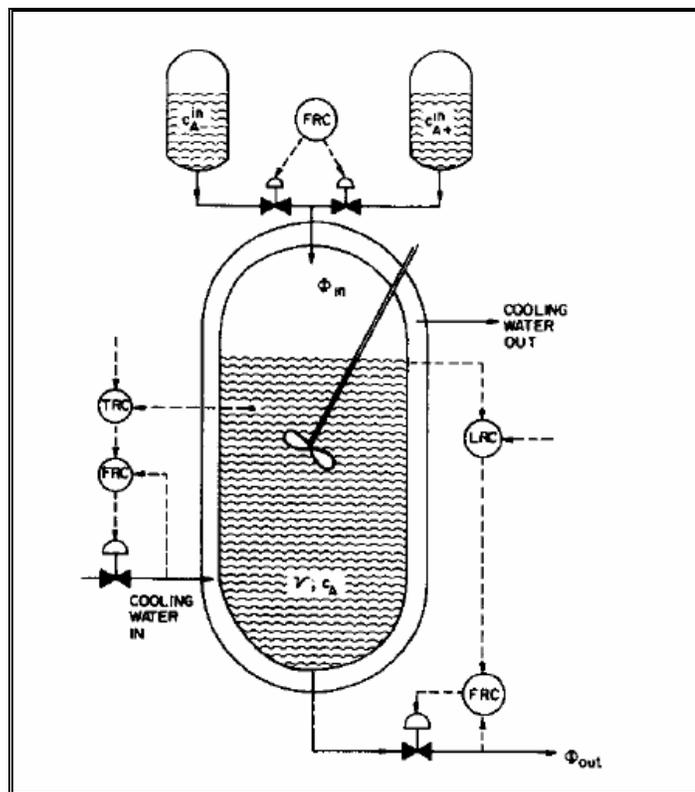


Figura 19. Configuración para un CSTR. TRC, LRC y FRC son controladores de temperatura, nivel y flujo, respectivamente.

En el artículo titulado *CSTR Performance limitations due to cooling jacket dynamic* [2], se presenta el comportamiento dinámico y estático que exhibe un CSTR cuan-

do presenta problemas operacionales debido al comportamiento dinámico no lineal en lazo abierto y a oscilaciones propias de esta configuración. En forma general, utiliza una estrategia de control en cascada, sin embargo, no se tiene en cuenta el comportamiento dinámico de la chaqueta de enfriamiento. El objetivo de este documento es mostrar que las características de estabilidad en lazo abierto de un CSTR exotérmico cambian cuando se incluye el comportamiento de la chaqueta de enfriamiento. Para ello se utilizan controladores PI y PID durante el estudio.

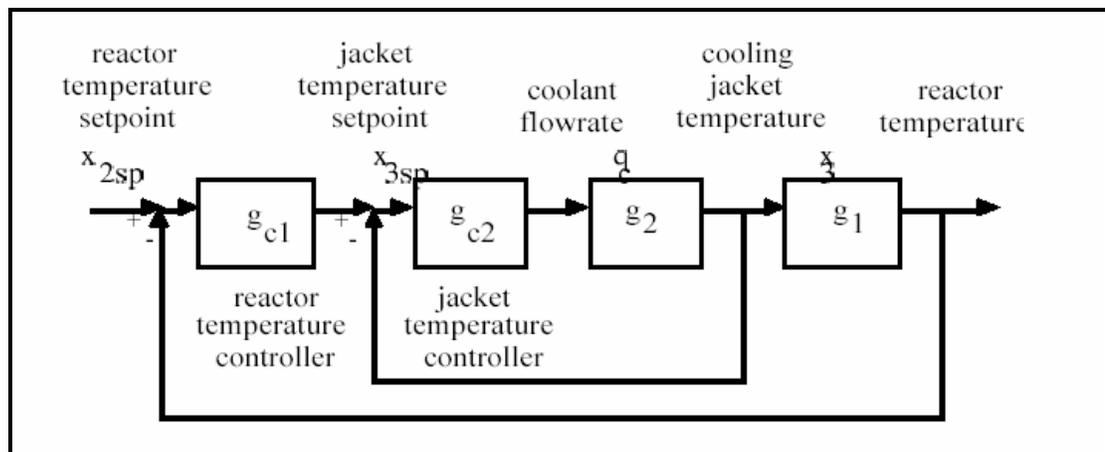


Figura 20. Esquema de control en cascada para un CSTR.

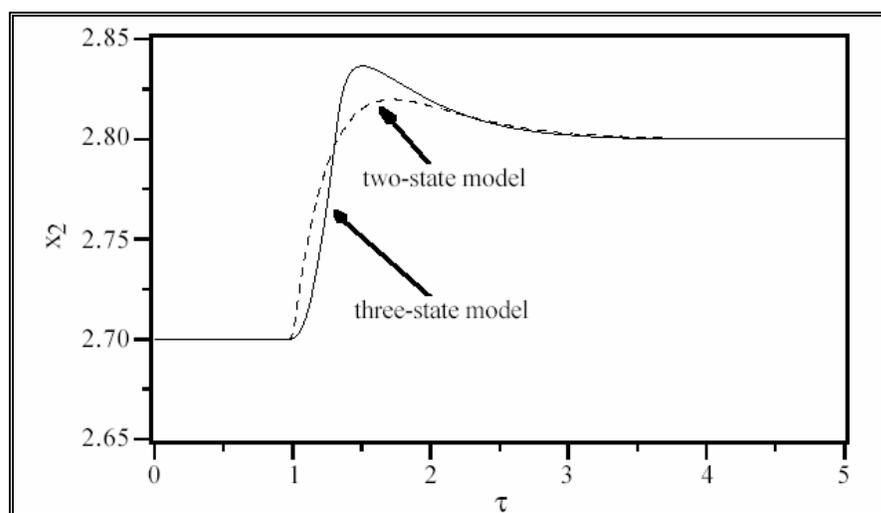


Figura 21. Respuesta de temperatura del modelo del reactor en lazo cerrado

Se analiza la multiplicidad de los tres estados del modelo para el CSTR y el efecto de los parámetros de diseño en el proceso para la estabilidad en lazo abierto. Los trabajos futuros involucrarán un controlador con sintonización de parámetros. También se determinará si la zona de inestabilidad en lazo abierto es mayor para el modelo de tres estados que para el modelo de dos estados.

En el artículo denominado “*Control of an industrial polymerization reactor using flatness*” [6] se estudia el diseño y la implementación de un controlador en un reactor industrial. Este controlador es de suma importancia ya que es el primero que utiliza la propiedad de *flatness* en el control de procesos industriales y también porque el sistema bajo consideración es la planta más grande de polimerización de propileno en el mundo. Originalmente, la propiedad de *flatness* de un sistema, fue estructurada para el estudio de los sistemas mecánicos. Este método expone los problemas más importantes en la teoría de control no lineal, como las interpretaciones de variables de control y linealización regenerativa. Implica una correspondencia uno a uno entre las trayectorias del sistema y un conjunto de variables reducidas llamadas *flatoutputs*. Gracias a este método, muchos de los problemas que se conocen se trasladan hacia un más bajo espacio dimensional donde toman valores reales. Dichos problemas son muy difíciles de resolver para los sistemas no lineales.

En la utilización de este método existen dos cantidades las cuales hay que tener en cuenta en la producción del polipropileno: la cantidad de producción y el índice

de fusión del polímetro que indica algunas de las propiedades mecánicas del polímero y es crítico para la inyección y la transformación del *thermoforming*.

Estas dos cantidades dependen linealmente de la cantidad de catalizador e hidrógeno que esta presente en el reactor y se calculan teniendo en cuenta las consideraciones económicas; además, esto provoca cambios frecuentes en el setpoint, el cual debe alcanzarse de una manera rápida y precisa para optimizar la ganancia. El problema es frecuente en diferentes procesos de polimerización, Así, el reto principal es controlar el sistema para una gama amplia de setpoint con alta exactitud y rendimiento dinámico. Estos requisitos hacen pensar que los controladores basados en sistemas de aproximaciones lineales tienen una baja probabilidad de éxito.

El proceso de polimerización se ilustra en la figura 22. El hidrógeno entra en el reactor directamente, mientras, el catalizador entra en el reactor después de un retraso debido al preproceso de activación. En pocas palabras, el catalizador actúa en la cantidad de producción, mientras el hidrógeno actúa en el índice de fusión del polímero.

Este sistema es muy complejo. Las simulaciones precisas del CSTR involucran miles de variables, sin embargo para el control se toma un conjunto de 4 ecuaciones diferenciales y 2 no lineales lo cual origina un equilibrio entre las ecuaciones y los estudios estadísticos. Desde el punto de vista matemático esto puede

interpretarse como un modelo de 2 entradas 2 salidas y un retardo en una de las entradas

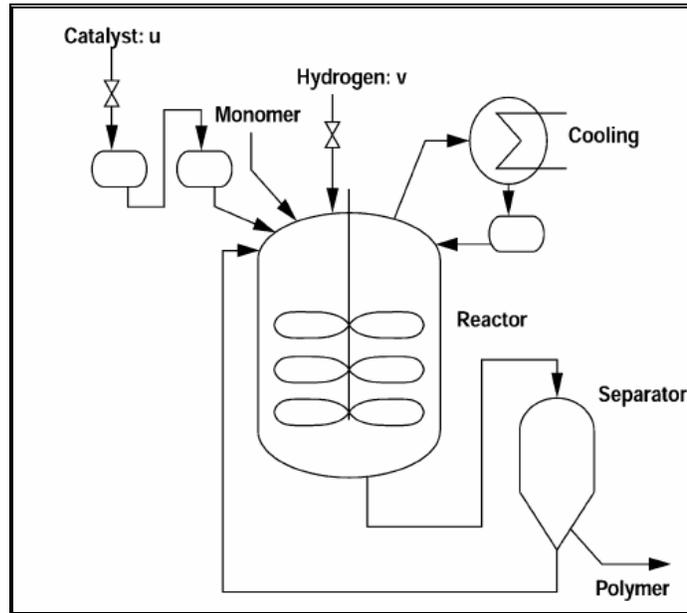


Figura 22. El proceso de polimerización: 2 entradas (u, v), 2 salidas (índice de mezclado y cantidad de producción)

El artículo denominado *Characteristics-based model predictive control of distributed parameter systems* [7] trata sobre el uso de los DPS. Estos son procesos en los cuales las variables de estado varían tanto en el espacio como en el tiempo. Un gran número de procesos industriales son de esta naturaleza, existen ampliamente en el sector químico, mecánico, del medio ambiente, fisiológico y económico. La descripción matemática de estos sistemas, toma la forma de las ecuaciones diferenciales Parciales (PDEs), y es obtenida aplicando las leyes de conservación. Muchos procesos de parámetros distribuidos son modelados por ecua-

ciones hiperbólicas de primer orden. Los controladores basados en modelos de PDE han reforzado el rendimiento de los sistemas de parámetros distribuidos. Utilizan el método de características en el desarrollo de un control de estado *feedback* y un control de salida *feedback* para sistemas de primer orden. El Modelo de control predictivo (MPC) determina la ley de control para sistemas de parámetros distribuidos, la cual expone que la operación del controlador influye ampliamente en el rendimiento del proceso. En este artículo se habla acerca de un MPC para procesos modelados por un PDE o por PDEs usando el método de características.

El trabajo denominado *Dynamic modelling of an industrial polypropilene reactor and its application in melt index prediction during grade transitions* [8] describe un modelo dinámico para la polimerización del polipropileno en un CSTR con un proceso *Hypol*. La calidad del producto final es un rasgo importante en la competitiva industria del polímero. En la industria de polimerización del propileno, varias calidades de polipropileno (PP) se producen en los reactores CSTR. El cambio de una cualidad específica a otra se lleva a cabo cambiando las condiciones de operación del reactor o usando un tipo diferente de catalizador. Sin embargo, a menudo estos cambios se producen en un tiempo relativamente largo y esto conlleva a que se produzcan cantidades significantes de polímeros fuera de especificación. En condiciones ideales sería crucial cambiar las condiciones de operación tan rápido como sea posible durante una transición de calidad del polímero.

En la industria, los polipropilenos se gradúan generalmente por sus características técnicas como son el índice de fusión (MI) y la densidad (p). Un problema común en la industria del polímero es la imposibilidad de medir las variables que determinan la calidad del polímero. La característica más crítica del polipropileno, el índice de la fusión, no se mide fácilmente. Por otro lado muchas de las otras variables del proceso como temperatura, presión, flujo, composición de gas, etc., presentan facilidad de medición. La combinación de información de las variables medidas con las que no son fácilmente obtenidas ayuda en el mejoramiento de la calidad del polímero final.

En este artículo se analiza un mecanismo de modelo dinámico de polimerización de propileno en CSTR de procesos *hypol*. Basado en este modelo dinámico, el índice de fusión del polipropileno puede ser calculado durante los grados de transición usando medidas *online* de un reactor industrial. Para eliminar el error del modelo causado por las incertidumbres del modelo y por las perturbaciones del proceso, el método de predicción de errores se ha aplicado para actualizar los parámetros del modelo en las aplicaciones *online*.

El proceso, que se ilustra en la figura 23, consiste en un tren de reactores en serie, dos CSTR, y dos reactores FBR. La alimentación del reactor es propileno, hidrógeno, y catalizador. Cuando se produce el copolímero, un comonomero (etileno o uno más alto: alfa-olefin) alimentará por delante al reactor.

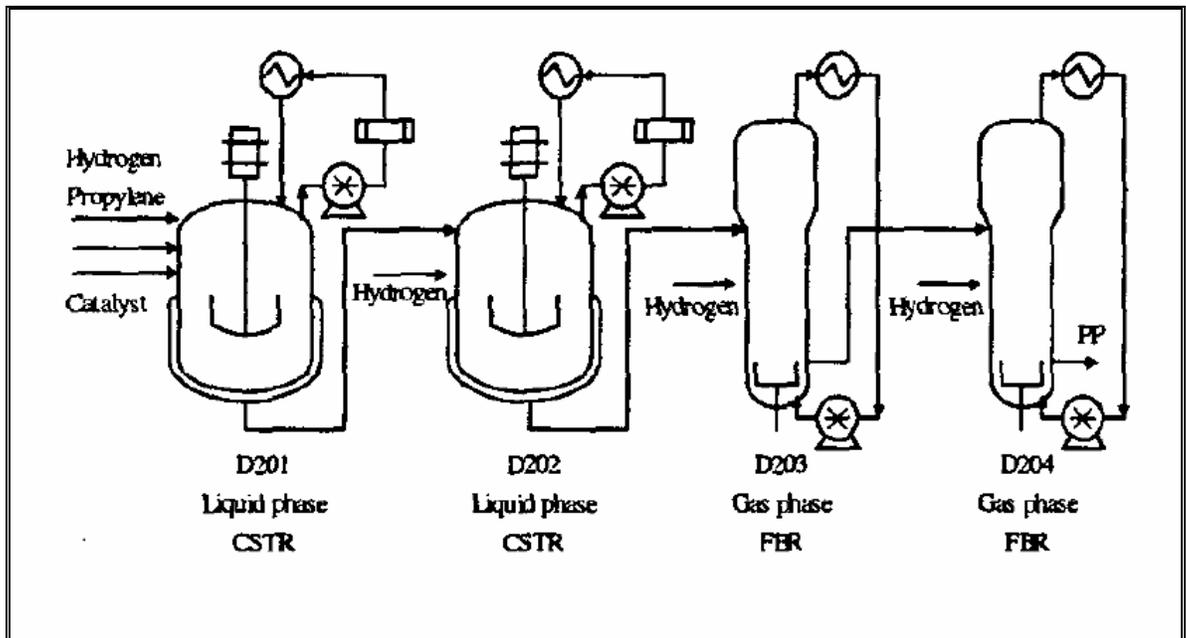


Figura 23. Diagrama esquemático simplificado del proceso Hypol para la polimerización del polipropileno.

Estos líquidos y gases suministran reactantes para el crecimiento de partículas de polímetro y proporcionan los medios de transferencia de calor. El índice de fusión y la densidad del polipropileno depende de las propiedades del catalizador, la composición del reactante, la temperatura del reactor, etc. El hidrogeno actúa como regulador del peso molecular del polipropileno. El cambio en el suministro del flujo de hidrogeno permite obtener el valor deseado del índice de fusión del polipropileno.

Para el año 2004, el artículo titulado *Consider Modeling transient state reactions with spreadsheets* [32] relacionado con el procesamiento de hidrocarbano en Ara-

bia Saudita, presenta una nueva técnica matemática para modelar las reacciones químicas en estado transitorio con un CSTR, utilizando hojas de cálculo del programa *Excel*. Se presentan soluciones analíticas y numéricas utilizando hojas de cálculo y lenguajes de programación como *FORTRAN*. El artículo consiste en la presentación de un modelo matemático que permite simular las reacciones químicas en un CSTR. Este modelo simula el comportamiento dinámico de una reacción química de primer orden con una descomposición constante en un reactor con flujo continuo.

En el mundo competitivo del conocimiento, los ingenieros y diseñadores tienen exigentes horas de trabajo y fechas críticas de proceso. Estas actividades van desde cálculos de proceso (Ej.: análisis de la caída de presión en una tubería, dimensionamiento de equipos e instrumentos, balanceo de materia y energía, etc.) hasta rigurosos cálculos computacionales que involucran el uso de cualquier programa o paquetes comerciales de simuladores. Los programas recientes para resolver ecuaciones han facilitado la solución de problemas complejos previamente manipulados con lenguajes de alto nivel como *FORTRAN*. Existe una amplia variedad de estos programas. La ventaja común de ellos es mostrar las soluciones en diversas formas (tablas o gráficas).

Una aplicación económica para solucionar ecuaciones es la hoja de cálculo. La estructura tipo matriz es ideal para resolver sencillos o complejos cálculos, desde ecuaciones algebraicas, ecuaciones no lineales con métodos numéricos, y ecua-

ciones diferenciales ordinarias o parciales. Los diagramas de las hojas de cálculo permiten a los ingenieros investigar los efectos de las diferentes variaciones y observar instantáneamente los resultados. Ha sido una herramienta importante en el modelamiento de procesos.

También ha permitido a los ingenieros actualizar continuamente archivos y revisar fundamentos para diseñar sistemas de ayuda. Se demuestra el alcance que tienen las hojas de cálculo al modelar una reacción química de primer orden con una descomposición de parámetros y simular un perfil de concentración en el tiempo durante un estado transitorio para un CSTR. Esto permite a los ingenieros monitorear el progreso de la reacción durante el inicio del proceso.

El CSTR es ampliamente utilizado en la industria de la química orgánica para muchas reacciones químicas (isomerización del ciclopropano a propano y descomposición de dimetil éter). La ventaja de este tipo de reactor es el control de temperaturas elevadas. La desventaja es la baja conversión de reactante por volumen del reactor. Así, se requieren varios CSTR en serie para obtener los niveles de conversión deseados. Un montaje típico es el mostrado en la figura 24.

Durante el análisis en estado estacionario se asume que los contenidos son perfectamente mezclados a una densidad constante. No ocurre asimilación en el sistema. Sin embargo, existe acumulación de concentración durante el arranque y el apagado (Ej.: inestabilidad).

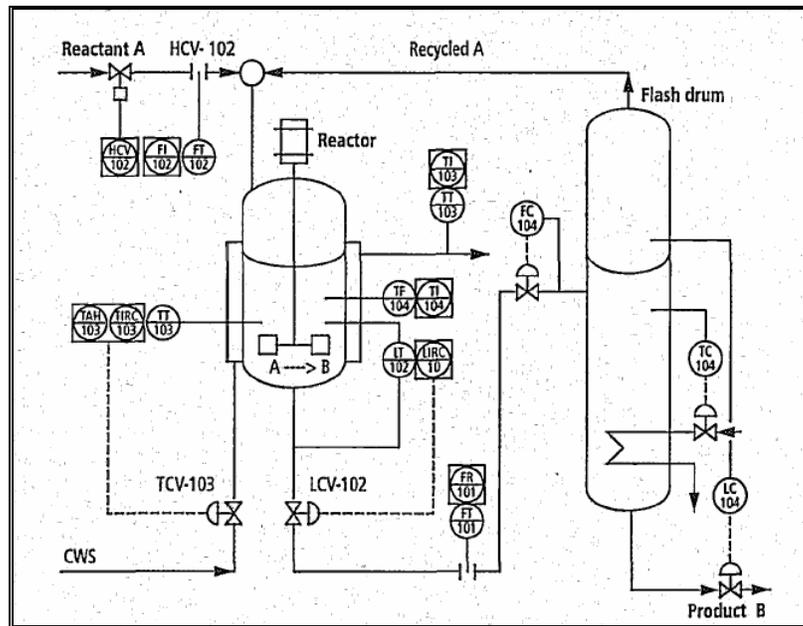


Figura 24. Sistema de control en planta para un CSTR.

El objetivo es modelar el proceso durante estos estados. En la figura 25 se muestra la respuesta dinámica del componente A en un CSTR sometido a una reacción de primer orden. Para la figura 26 se muestra los resultados en *Excel* usando métodos analíticos. Las figuras 27 y 28 muestran respectivamente los resultados de las hojas de cálculo y *FORTRAN* usando el método numérico de cuarto orden de Runge-Kutta durante condiciones transitorias.

Para el balance de materiales en el sistema se tienen en cuenta, los flujos de entrada y salida y la acumulación de material que se presenta en el proceso, junto con las pérdidas. Se obtienen las expresiones matemáticas para determinar la concentración de A (concentración inicial) durante las condiciones transitorias.

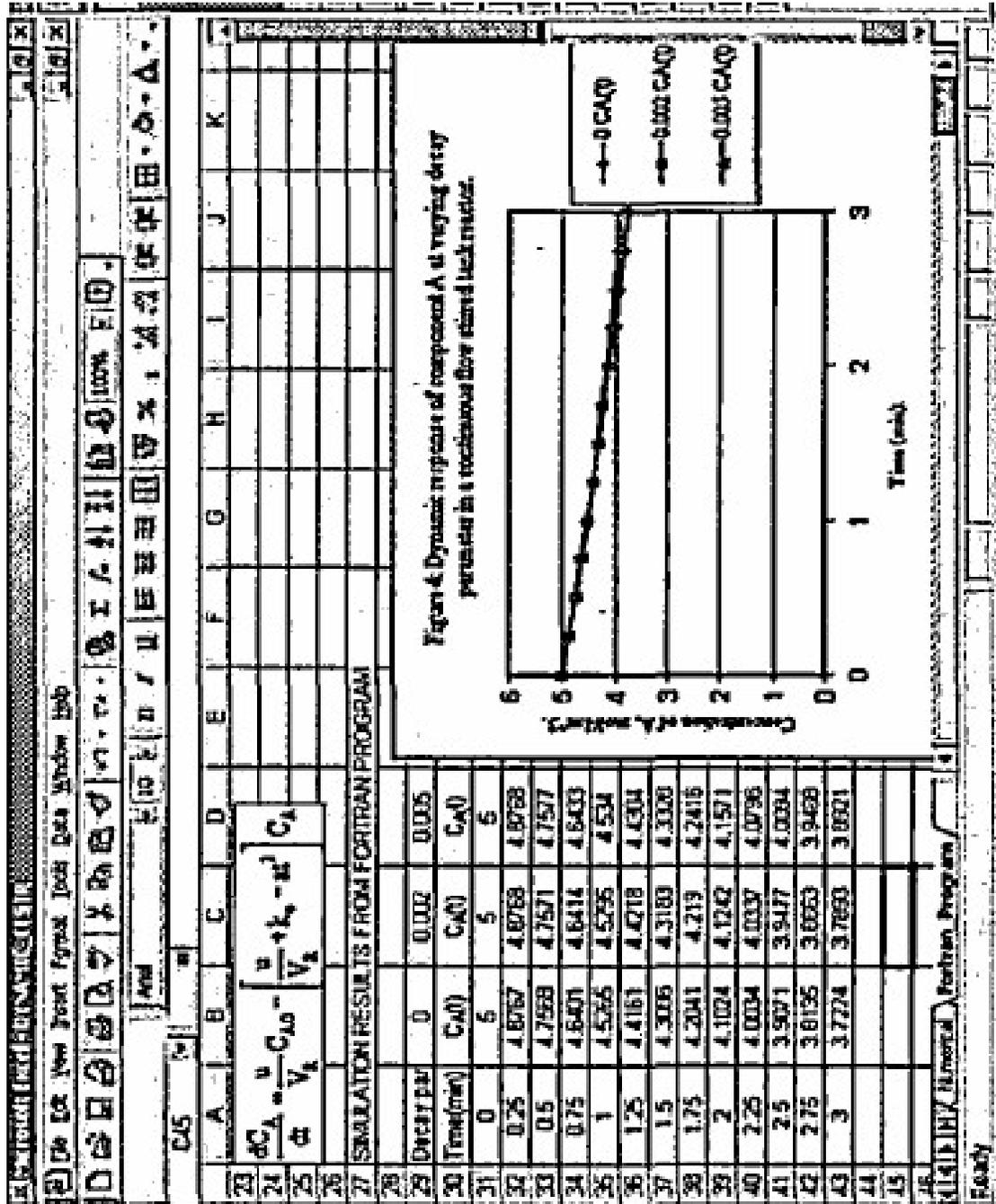


Figura 25. Simulación del modelo usando Excel

Estas expresiones están limitadas por la constante “ k ”, la cual debe ser positiva. Esta limitación debe ser introducida en el modelo, de otra forma, la respuesta de la concentración será inválida. Dentro de los parámetros que se consideran para el modelamiento están: parámetro de descomposición “ a ”, volumen del material “ u ”, Volumen del reactor “ V_r ”, Concentración inicial “ C_{ao} ”. Estas variables se ilustran en la figura 29.

La versión mas reciente de Excel usa el método para solucionar ecuaciones de cuarto orden Runge-Kutta. Así, se obtienen las expresiones teniendo en cuenta la variación del parámetro de descomposición. Las simulaciones se hicieron variando “ k ”. Las figuras muestran la concordancia entre los métodos para determinar la condición de estado inestable del sistema. Los análisis de los resultados también demuestran como la respuesta dinámica se reduce conforme se incrementa “ a ”. *Excel* permite que ambos resultados de la simulación dinámica sean mostrados simultáneamente. Se muestra que los perfiles dinámicos involucrados en estos métodos están en concordancia y pueden de este modo ser empleados para simular diferentes variables.

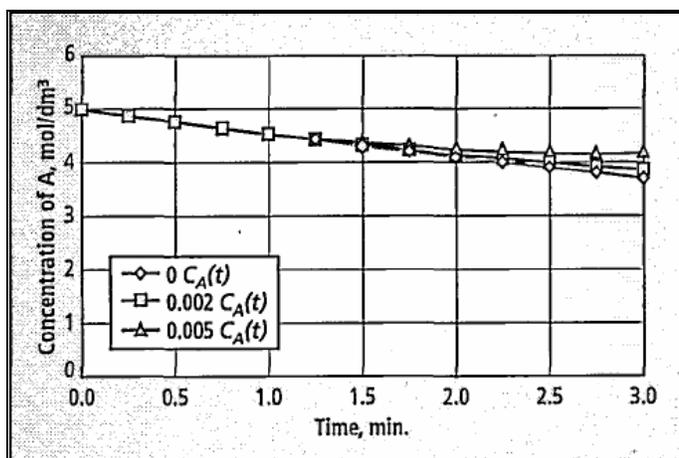


Figura 26. Simulación utilizando métodos analíticos

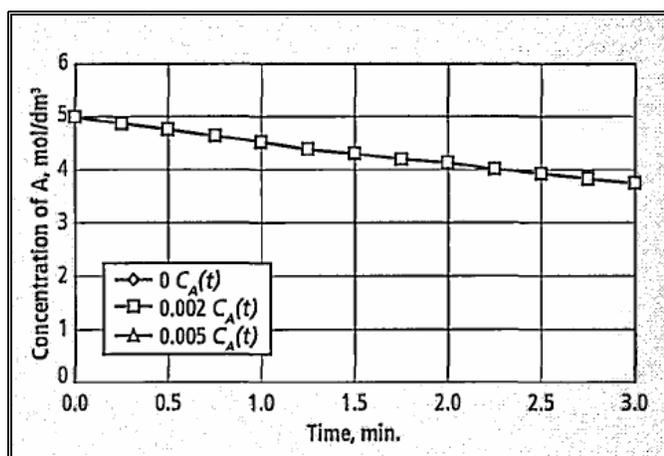


Figura 27. Resultado de la simulación utilizando hojas de cálculo de Excel

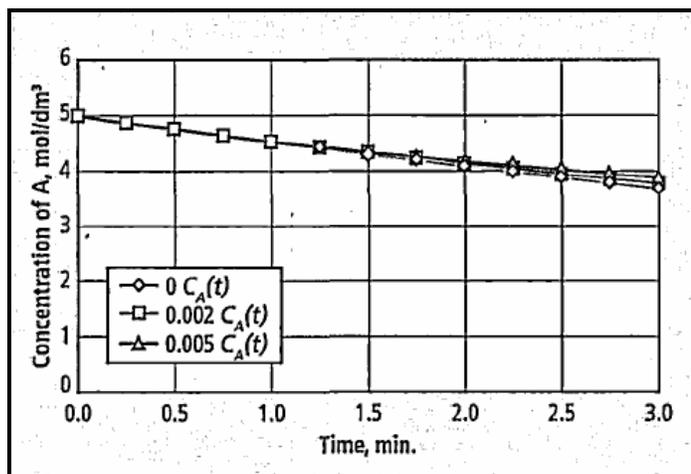


Figura 28. Resultado utilizando FORTRAN con métodos numéricos.

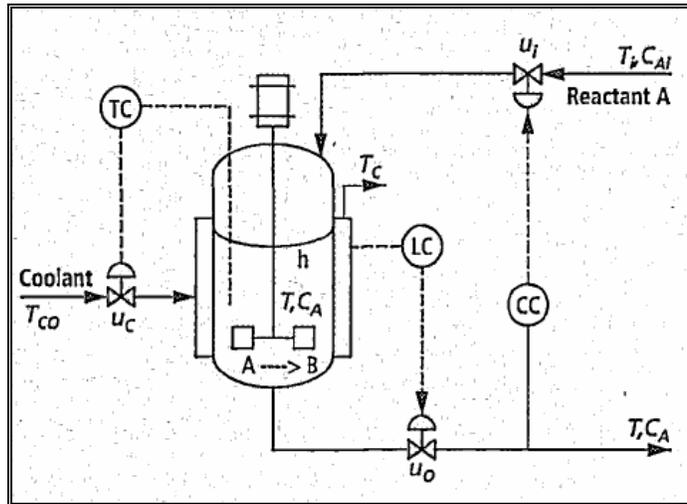


Figura 29. Variables utilizadas en el control de proceso para un CSTR

El modelo matemático puede ser útil para el análisis y el control de procesos en diferentes formas:

- Facilitar la comprensión de las reacciones: Los modelos pueden ser usados para investigar las respuestas transitorias sin el costo y el riesgo potencial de operar el proceso en tiempo real. Este enfoque debe ser justificado cuando no es factible ejecutar experimentos en la planta o antes de que esta haya sido construida.
- Entrenamiento del personal de planta: los operadores de planta pueden ser entrenados para operar un proceso complejo; si el programa es “adaptado” para instrumentación estándar de control de procesos. Un ambiente simu-

lado puede ser usado para el entrenamiento del personal sin costos o posibles condiciones riesgosas que puedan existir en una situación real.

- Seleccionar parámetros del controlador: El modelo puede ser utilizado para configurar en forma optima el controlador

- Optimizar las condiciones de operación del proceso.

- Diseñar estrategias de control.

6. CONCLUSIONES

A partir de la información reseñada en el presente trabajo, podemos concluir sobre la importancia del modelamiento y simulación dinámica de procesos químicos en el campo de la automatización industrial, las ciencias computacionales y procesos automatizados. La fuerte dependencia tecnológica que presenta nuestro país en este ramo de la industria química hace necesario que actuales y futuros ingenieros desarrollen esta área, consoliden aquellos trabajos que se vienen desarrollando y que se vinculen con sus investigaciones de manera activa para crear una fuerza de trabajo capacitada. El desarrollo de un país se mide por su inversión en la investigación. Teniendo como base esta premisa, podemos concluir sobre la importancia de desarrollar trabajos de este estilo con el fin de establecer un modelamiento que permita establecer factores de seguridad, tiempos de respuesta y comportamientos indeseados para tomar decisiones acertadas encaminadas a la optimización de procesos de suma importancia. La información contenida en este estado del arte se convierte en una referencia para el adelanto de futuros trabajos en esta área.

Este tema es de carácter estratégico para nuestro país como punta de lanza para competir con productos de óptima calidad ante un futuro mercado global. Ante las actuales circunstancias económicas de nuestro país es de suma importancia el desarrollo tecnológico en campo industrial con el fin de enfrentar con alto grado de competitividad el intercambio industrial con los países que estén vinculados con el

Tratado de Libre Comercio. La industria petroquímica del país debe estar en capacidad de elaborar productos de gran calidad y eficiencia. Dentro de estas consideraciones, el medio ambiente constituye la principal preocupación. Las investigaciones en el campo de la optimización de procesos están encaminadas a reducir el impacto sobre el medio ambiente y de esta manera lograr una sensible reducción de costos. De igual manera, el mejoramiento continuo de la calidad de los productos exige que entidades de carácter académico trabajen de la mano con las industrias. En el ámbito local, la Universidad Tecnológica de Bolívar pretende incursionar con tecnología y asesoría en el campo de la automatización industrial para apoyar el crecimiento y competitividad de nuestras empresas de una manera interdisciplinaria, como reza la misión y visión de esta institución.

Las diferentes técnicas tratadas en este documento permiten reseñar en orden de importancia cuales son las herramientas de vanguardia para el modelamiento dinámico de procesos complejos. Las herramientas matemáticas para el modelamiento de los reactores de polimerización ayudan a identificar de manera eficaz el comportamiento de los equipos utilizados en este proceso, como el CTSR, muy importante en la industria de la polimerización. El conocimiento de estas técnicas permite a los estudiantes de la Tecnológica ganar competitividad ante un mundo que evoluciona constantemente.

7. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- [1] **HERBERT J.A.F. Tulleken**, "Application of the grey-box approach to parameter estimation in physicochemical models". Decision and Control, Proceedings of the 30th IEEE Conference. Estados Unidos. Pags: 1177 - 1183 vol.2 .1991.
- [2] **LOUIS P. RUSSO AND B. WAYNE BEQUETTE**, "CSTR Performance limitations due to cooling jacket dynamic". The Howard P. Isermann Department of Chemical Engineering, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, NY 12180-3590, Estados Unidos, 1992.
- [3] **XU, L. JIANG, J.-P. ZHU, J.** "Supervised learning control of a nonlinear polymerization reactor using the CMAC neural network for knowledge storage". Departamento de Ingeniería de la Universidad de Zhejiang, China Control Theory and Applications. IEEE. Pags: 33-38. 1994
- [4] **AL TUWAIN, M.S., CRISALLE, O.D., SVORONOS, S.A.**, "Discretization of nonlinear model using a modified Carleman linearization technique". Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Florida, American Control Conference. IEEE. Estados Unidos. Pags 3084-3088. 1998.
- [5] **KENICHI OHMURA, YUTAKA HAYASHIDA, TOSHIO KUJIRA**, "An Application of Dynamic Simulation in Advanced Control", Technical Department Omega Simulation of Mitsui Chemicals, Japón. 1998.

- [6] **N. PETIT, P. ROUCHON, J.-M. BOUEILH, F. GUÉRIN, P. PINVIDIC**, “Control of an industrial polymerization reactor using flatness”, École Nationale Supérieure des Mines de Paris. Francia. 2001.
- [7] **HUILAN SHANG. FORBES, J.F. GUAY, M.** “Characteristics-based model predictive control of distributed parameter systems”, American Control Conference, Departamento de Ingeniería Química y de Materiales de la Universidad de Alberta, Canadá. Pags 4383-4388. 2002.
- [8] **JIANLI WEI. SHUNJIE FAN. YONGMAO XU. JIE ZHANG.** “Dynamic modelling of an industrial polypropilene reactor and its application in melt index prediction during grade transitions”, American Control Conference, Departamento de Automatización de la Universidad de Beijing, China. Pags: 2725-2730. 2002.
- [9] **N.M. GHASEM, M.A. HUSSAIN, I.M. MUJTABA.** “The use of Simulink block diagram to solve mathematical models and control equations”. Departamento de Ingeniería Química Universidad de Malaya, Malasia. Revista de facultad de Ciencias Pontificia Universidad Javeriana. Colombia. 2003.
- [10] **ZALAMEA, LUIS.** “Modulo Simulador de Reactores químicos”. Tesis Ingeniero Químico. Universidad Nacional de Colombia. No Sistema 000071794. 314p. 2003.
- [11] **ANTONIO FLORES-TLACUAHUAC. VICTOR ZAVALA-TEJEDA,** “Full-Scale Bifurcation Analysis of the High-Impact Polystyrene Process”. Departamento de Ingeniería y Ciencias Químicas Universidad Iberoamericana. México. 2003.

- [12] **SANTIAGO GARRIDO**, "Identificación, estimación y Control de Sistemas No-Lineales mediante RGO". Departamento de Ingeniería de Sistemas y Automática Universidad Carlos III de Madrid. Leganés. España. 1999.
- [13] **L.A. ZADEH**. "From circuit theory to system theory". Paginas 856-865, 1962.
- [14] **L-LJUNG**. "System Identification: Theory for the user". Prentice Hall, Englewood Cliffs. N.J., 1987.
- [15] **T. SODERTRON Y P. STOICA**. "System Identification". Prentice Hall International, Hemel Hempstead, Hertfordshire, 1989.
- [16] **R.J. CARROL Y D.RUPERT**, "Transformation and Weighting in regresion". Chapman and Hall, New York, 1988.
- [17] **P. McCULLAGH Y J.A.NELDER**. "Generalized Linear Models". Chapman and Hall, New York, 1989.
- [18] **C.R.JOHNSON**, "Admisibility in blind adaptative channel equalization". IEEE Control Systems Magazine, 1991.
- [19] **U.GRENANDER**, "Abstract Inference". Wiley, New York, 1981.
- [20] **J.J. HOPFIELD Y D.W. TANK**, "Neural Computation of decisions in optimization problems", Biol. Cybern. 1986.
- [21] **I. GUJON Y P.ALBRECHT**, "A time delay neural network character recognizer for touch terminal. Technical Report, ATT Bell Laboratories. 1990.
- [22] **D.E. RUMENHART, G.E. HINTON, AND R.J. WILLIAMS**. "Parallel distributed processing", Volumen 1, Capitulo: Learning Internal representations by error backpropagation, Paginas: 318-362. 1986.

- [23] **P. PODDAR Y D.Q.MAYNE**, “An algorithm for optimization problems with functional inequality constraints”, IEEE, Trans. On Automatic Control, 1976.
- [24] **K. ÑARENDRA Y K. PARTHASARATHY**, “Gradient methods for the optimization of dynamical systems containing neural networks. IEEE, Trans on Neural Network, 1991.
- [25] **P.J. WERBOS**, “Back propagation through time: What it does, how do it”. Proceedings IEEE, 1990.
- [26] **M. GEVERS**, Toward a joint design of identification and control. In H.L. Trentelman and J.C. Willems, editors, “Essays on Control: perspectives in the theory and its applications”, Paginas: 111-151. Birkauser, 1993.
- [27] **W. S. LEE, B. D. O. ANDERSON, I. M. Y. MAREELS, AND R. L. KOSUT.** On some key issues in the windsurfer approach to adaptive robust control. *Automatica*, 31(11):1619–1636, 1995.
- [28] **P. M. J. VAN DEN HOF AND R. J. P. SCHRAMA.** “Identification and control closed-loop issues”. *Automatica*, 31(12):1751–1770, 1995.
- [29] **U. FORSELL.** “Closed-loop Identification”. PhD thesis, Linköping University, Linköping, Suecia, 1999.
- [30] **U. FORSELL AND L. LJUNG.** “Issues in closed-loop identification”. Technical report, Linköping University, Linköping, Suecia, 1998.
- [31] **I. GUSTAFSSON, L. LJUNG, AND T. SÖDERSTROM.** “Identification of processes in closed loop – identificability and accuracy aspects”. *Automatica*, 13:59–75, 1977.

- [32] **A. K. COKER**, "Consider modeling transient state reactions with spreadsheets", Department of Chemical and Process Engineering Technology, Jubail Industrial College, Arabia Saudita. 2004.

8. GLOSARIO

- ❖ ARMAX: Auto-Regressive Moving Average with eXogenous inputs. Técnica de auto regresión con entradas de valor promedio.
- ❖ Backpropagation in Dynamic Systems (BPD): Configuración de red neuronal para sistemas dinámicos.
- ❖ CSTR: " CONTINUOUS STIRRED TANK REACTOR" Reactor tipo tanque continuamente agitado.
- ❖ CMAC: " Cerebellar Model Articulation Controller". Modelo de controlador por articulación cerebral.
- ❖ DPS: "Distributed Parameter Systems". Sistemas de parámetros distribuidos.
- ❖ EKF: Filtro extendido de Kalman.
- ❖ GB M&I: Grey Box Modeling and Identification Methods.
- ❖ Hypol: Proceso especial para polimerización del polipropileno.

- ❖ MDC: “Model Predictive Control”. Modelo de control predictivo.

- ❖ MIMO: Múltiples entradas y múltiples salidas.

- ❖ MRAC: “Model Reference Adaptive Control”. Control Adaptativo utilizando Modelos de Referencia.

- ❖ NARMAX (Non- linear Auto-Regressive Moving Average with eXogenous inputs. Técnica de auto regresión con entradas de valor promedio no lineal.

- ❖ OE: “Output Error”. Error en la salida.

- ❖ PDF: Función de densidad de probabilidad condicional.

- ❖ SISO: “Single In- Single Out”. Modelo de una entrada y una salida.

- ❖ Time Delay Neural Networks (TDNN): Retardo de tiempo en Redes Neuro-
nales.