

LA TEORÍA DE REDES EN INGENIERÍA DE CONTROL: APLICACIÓN AL ANÁLISIS DINÁMICO Y AL CONTROL DE PROCESOS

Luis T. Antelo, Irene Otero-Muras, Julio R. Banga,
Antonio A. Alonso

*Grupo de Ingeniería de Procesos, Instituto de Investigaciones Marinas (CSIC). Eduardo Cabello, 6
36208, Vigo (ESPAÑA)*

Resumen: Los procesos de la industria química, alimentaria o biotecnológica, así como muchos de los mecanismos propios de la biología de sistemas, pertenecen a la clase de los llamados *sistemas de proceso*. En esta contribución se hace uso de un conjunto de resultados previos que combinan aspectos de la teoría de sistemas y grafos, con métodos de termodinámica y de redes de reacción para así sentar las bases sobre las que elaborar una representación formal y generalizada de procesos en términos de redes complejas.

Esta representación -parcialmente desarrollada por los autores- además de unificar un amplio número de procesos aparentemente diversos, proporciona una sistemática eficiente con la que abordar los problemas de control descentralizado y análisis dinámico avanzado (incluyendo el análisis de bifurcación). *Copyright © 2007 CEA-IFAC.*

Palabras clave: Redes Complejas, sistemas de proceso, análisis dinámico, análisis de bifurcación, control descentralizado.

1. INTRODUCCIÓN

Desde un punto de vista global, los *sistemas de proceso* pueden caracterizarse como aquellos que obedecen las leyes de la termodinámica (Alonso *et al.* 2004). Una planta química completa, una columna de destilación, un reactor o una ruta metabólica en el interior de la célula son ejemplos de *sistemas de proceso*. Sin embargo, tanto su análisis dinámico como el control y operación de éstos se ha venido abordando tradicionalmente de manera descontextualizada, desaprovechando por lo tanto, muchas de las analogías y propiedades intrínsecas que los caracterizan como *sistemas de proceso*. Esto es debido en gran medida a la carencia de una representación unificada y de carácter general para los mismos.

En algunos trabajos previos se ha abordado parcialmente el problema de la representación formal unificada a fin de caracterizar la estabilidad estructural de plantas químicas (Hangos *et al.* 1999) o el control de inventarios (Farschman *et al.* 1998). En esta contribución se propone una descripción formal generalizada de los *sistemas de proceso*. Se trata de una herramienta conceptual que hace uso de una representación en grafos definidos por conjuntos de nodos caracterizando fases materiales, y conectados mediante una topología definida, a su vez asociada a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias.

Este conjunto de ecuaciones, que definen el modelo del sistema de proceso puede escribirse de forma general como:

$$\dot{z} = f(z, k) \quad (1)$$

donde z es el vector de variables de estado y k los parámetros del sistema, o magnitudes que se mantienen constantes durante todo el proceso. Para los *sistemas de proceso*, la primera ley de la termodinámica, relacionada con la conservación de propiedades, establece las ecuaciones del modelo correspondientes a los balances de materia, energía y cantidad de movimiento, mientras que la segunda ley de la termodinámica fija la dirección en la que evolucionan los estados en el tiempo, proporcionando un candidato a función de Lyapunov (la entropía) para el análisis dinámico (Alonso y Ydstie 2001).

Los sistemas termodinámicos fuera del equilibrio o sometidos a fuerzas externas evolucionan mediante procesos irreversibles que producen entropía hacia el equilibrio termodinámico (igualdad de temperaturas, potenciales químicos y presión). Por otra parte, los *sistemas de proceso* son sistemas termodinámicos abiertos que intercambian materia, energía o momento con los alrededores a través de la frontera del volumen de control (Demirel 2002). Esta interpretación de los sistemas basada en la termodinámica es útil a la hora de construir el grafo asociado, pues permite definir los nodos como subsistemas termodinámicos y las conexiones como las relaciones de transporte de propiedades entre los distintos subsistemas y con los alrededores.

Los fenómenos de transporte característicos de esta clase de sistemas poseen un origen diverso, lo que resulta en diferentes tipos de conexiones (con topologías distintas asociadas a las ecuaciones características de cada fenómeno). Los fenómenos convectivos son debidos a movimientos en masa de fluidos, mientras que los fenómenos disipativos son consecuencia directa de choques entre partículas (Alonso *et al.* 2002). Los fenómenos disipativos que tienen lugar en los *sistemas de proceso* incluyen (Alonso *et al.* 2000):

-La *difusión*, gobernada por las leyes de Newton, Fick y Fourier para el transporte conductivo de momento, masa y energía, respectivamente. Estas leyes se caracterizan por ecuaciones lineales con respecto a los estados.

-La *transferencia entre interfases*, descrita generalmente mediante leyes empíricas basadas en las anteriores, también lineales con respecto a los estados.

-Las *reacciones químicas*, que también se clasifican dentro de los fenómenos de tipo disipativo (Gorban *et al.* 2004), aunque en este caso están regidas por una ley de tipo no lineal con respecto a los estados: la *ley de acción de masas*.

Los fenómenos convectivos y de transferencia por difusión característicos de los *sistemas de procesos* tienen lugar en dos escalas de tiempo diferenciadas, lo cual ocasiona que el grafo de la red representativa de estos sistemas posea una estructura **jerarquizada**, apareciendo subredes dentro de la red compleja principal (Antelo *et al.* 2007a). Este aspecto, particularmente crítico en la interpretación de las redes de proceso, se describirá en detalle en la sección dedicada al formalismo teórico.

Una vez que el modelo fenomenológico de un *sistema de procesos* se asimila a esta descripción en forma de red compleja, éste deja de ser una "caja gris", proporcionando tanto el significado físico como la estructura matemática necesaria para abordar el análisis dinámico y el control de manera eficiente y sistemática. A continuación se enumeran algunas de las utilidades de la representación generalizada propuesta en este trabajo, en varios ámbitos de la ingeniería de procesos:

Modelado: Una herramienta conceptual como es el grafo asociado a un sistema de proceso permite utilizar de manera más eficiente los nuevos entornos de modelado informáticos para la simulación de procesos (EcosimPro, gPROMS, etc) basados en la programación orientada a objetos. Asimismo representa un avance hacia un lenguaje unificado de modelado.

Análisis dinámico: en un enfoque clásico, la concepción de los *sistemas de proceso* como redes de subsistemas termodinámicos interconectados sistematiza el uso de métodos basados en la *teoría de Lyapunov*, por ser la entropía termodinámica una función de Lyapunov inherente a estos sistemas. Además, la entropía es una posible función de almacenaje para un análisis de estabilidad basado en *teoría de pasividad*, muy útil a la hora de estudiar la estabilidad de sistemas a partir de las propiedades dinámicas de los subsistemas acoplados que los componen.

Desde un enfoque más puramente estructural, la conectividad característica de un grafo está relacionada con la dinámica de los sistemas, tal como se demuestra, por ejemplo, con la relación entre las conexiones en configuración de *feedback positivo* y la aparición de multiplicidad de estados estacionarios (Angeli *et al.* 2004). La no linealidad presente en las conexiones relacionadas con la *ley de acción de masas* es la causante de patrones característicos, fenómenos de autoorganización, ciclos límite, multiplicidades u otro tipo de comportamientos no lineales complejos. En la sección de aplicaciones se ilustrará cómo propiedades inherentes al grafo de una red de reacciones determinan la estabilidad asintótica o la presencia de comportamiento complejo en el sistema.

Análisis de bifurcación: los modelos que nos ocupan contienen parámetros que se mantienen constantes durante todo el proceso, como son las difusividades, constantes cinéticas, coeficientes globales de transmisión de propiedad, etc. La presencia de muchos parámetros hace que el análisis clásico de bifurcación no sea aplicable en la mayoría de los casos. En la sección de aplicaciones se muestra un nuevo método (Otero-Muras *et al.* 2006b) en el que una propiedad estructural de las redes se usa para parametrizar las ecuaciones del modelo en función de un número reducido de parámetros. De esta manera se divide el espacio de parámetros originales en regiones con distinto comportamiento dinámico.

Control descentralizado: En la sección de aplicaciones se ilustrará el uso de las redes de proceso y de inventario aplicadas al diseño sistemático de estructuras descentralizadas de control

2. FORMALISMO TEÓRICO

2.1 Jerarquías en la red asociada a un proceso

Como redes complejas, las redes de proceso se representan mediante un grafo jerarquizado. A continuación se ilustra esta jerarquía de la red asociada a un sistema de proceso describiendo los conceptos de red de proceso, red de inventario, subredes disipativas y redes de reacción.

Las **redes de proceso** (Antelo *et al.* 2007a, Antelo *et al.* 2007b) se definen como un conjunto $j=1, \dots, \theta$ de regiones homogéneas conectadas por flujos de materia y energía, que a su vez pueden ser de carácter convectivo o disipativo. Las conexiones convectivas son un conjunto de θ flujos, que para cada nodo se denominan $f_j \in \mathbb{R}^{+c}$ (flujo de materia) y $p_j(f_j) \in \mathbb{R}^+$ (flujo de energía). Las conexiones disipativas se representan mediante los vectores $\varphi^k \in \mathbb{R}^{+d_c}$ ($k=1, \dots, c$) y $\psi \in \mathbb{R}^{+d_u}$, donde d_c y d_u denotan las transferencias de materia y energía, respectivamente. De manera gráfica, como se muestra en la Figura 1, los flujos disipativos se simbolizan mediante dobles flechas continuas (transporte de materia) y discontinuas (transporte de energía), mientras que los flujos convectivos se representan mediante una sola flecha.

La dinámica de las redes de proceso se representa formalmente mediante el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias para la masa en moles n y la energía u :

$$\dot{n}^k = N_0 f_0^k + N_\phi f^k + N_\varphi \varphi^k + \mathcal{R} \quad (2)$$

con $n^k, f^k \in \mathbb{R}^{+\theta}$; $f_0^k \in \mathbb{R}^{+d_i}$; $k = 1, \dots, c$ y

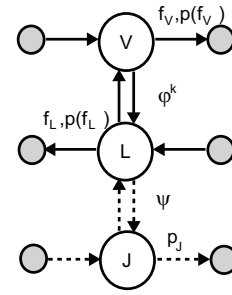


Figura 1. Red de proceso para un plato genérico de destilación con intercambio de calor. Los nodos L y V indican la fase líquida y vapor, respectivamente. El nodo J corresponde a un intercambiador.

$$\dot{u} = N_0 p_0 + N_\phi p + N_\psi \psi + Q \quad (3)$$

con $u, p \in \mathbb{R}^{+\theta}$; $p_0 \in \mathbb{R}^{+d_i}$. En estas últimas expresiones, $f_0 \in \mathbb{R}^{+d_i}$ es el vector de entradas convectivas (y d_i el número de entradas) y las matrices $N_0 \in \mathbb{R}^{+\theta \times d_i}$, $N_\phi \in \mathbb{R}^{\theta \times \theta}$, $N_\varphi \in \mathbb{R}^{\theta \times d_c}$ y $N_\psi \in \mathbb{R}^{\theta \times d_u}$ denotan conexiones disipativas y convectivas. Finalmente, los términos \mathcal{R} y Q presentes en (2)-(3) se han incluido para considerar los efectos de las reacciones químicas y fuentes externas de calor, respectivamente.

Los fenómenos convectivos y de transferencia característicos de los *sistemas de proceso* tienen lugar en dos escalas de tiempo diferenciadas. Analizando, por ejemplo, lo que ocurre en la red de proceso asociada al plato de una columna de destilación sin intercambio de calor, se obtiene el esquema representado en la Figura 2. Para un instante de tiempo t , el flujo convectivo introduce un paquete de fluido definido por las condiciones iniciales de dicho flujo. Entonces, se genera un fenómeno disipativo en un instante de tiempo ε debido a la existencia de gradientes de potencial (ya sea potencial químico, temperatura o presión), que hace que el sistema evolucione hasta el estado de equilibrio, en el cual dichos potenciales se hacen cero. Tras esto, en un instante $t + \varepsilon$, tiene lugar la descarga del primer paquete de fluido y la entrada del siguiente. En el intervalo de tiempo ε , el sistema puede considerarse cerrado, existiendo únicamente flujos disipativos.

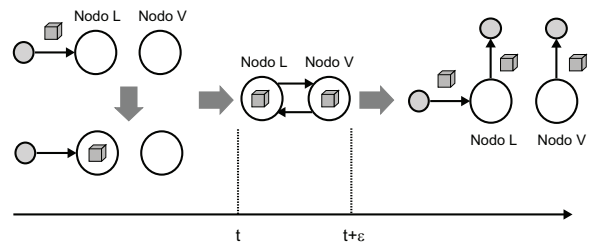


Figura 2. Escalas de tiempo asociadas al transporte de materia convectivo y disipativo para un plato de destilación.

Este hecho permite establecer una jerarquía en el grafo de una red de proceso, a través del concepto de *redes de inventario* (ver Figura 3). En Antelo y colaboradores (Antelo *et al.* 2007a, Antelo *et al.* 2007b) se define una *subred disipativa* $D(\theta_j)$, como aquella subred formada por θ_j nodos interconectados únicamente por flujos disipativos. De esta forma, cada subred disipativa es, a su vez, un nodo de la *red de inventario* asociada formada por ℓ nodos conectados únicamente mediante flujos convectivos.

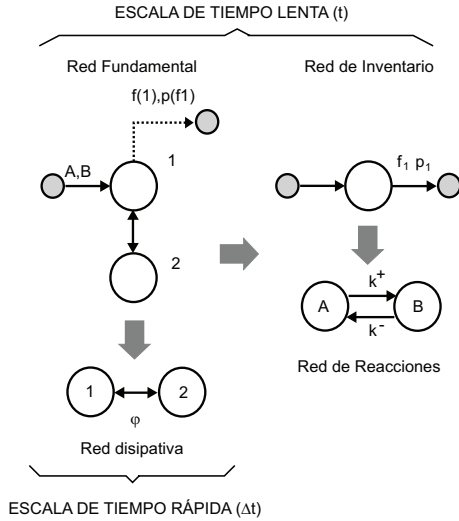


Figura 3. Relación jerárquica entre las subredes en una red de proceso y su relación con las redes de inventario.

La expresión para la red de inventario asociada a (2)-(3) es:

$$\dot{n}_{\mathcal{I}} = \mathcal{N}F_{\mathcal{I}} + \mathcal{R} \quad n_{\mathcal{I}}, F_{\mathcal{I}}, \mathcal{R} \in \mathbb{R}^{+\ell} \quad (4)$$

$$\dot{u}_{\mathcal{I}} = \mathcal{N}p_{\mathcal{I}} \quad u_{\mathcal{I}}, p_{\mathcal{I}} \in \mathbb{R}^{+\ell} \quad (5)$$

Nótese que la dinámica global puede representarse por un sistema de la forma (1), en el que para c_j componentes químicos, el vector de estados z_j asociado a cada nodo posee dimensión $c_j + 2$ y es de la forma:

$$z_j = (n_{1j}, \dots, n_{c_jj}, u_j)^T. \quad (6)$$

2.2 Estructura de las redes de reacción

El término \mathcal{R} en (4) incluye las posibles reacciones químicas presentes en los nodos del proceso que a su vez pueden describirse mediante una *red de reacciones*. Ésta está constituida por un conjunto de r pasos de reacción entre c especies químicas, como la representada en la Figura 4.

En la *teoría de redes de reacción* o *CRNT* desarrollada por Feinberg, Jackson y Horn (Feinberg 1979), éstas se representan mediante un grafo dirigido sobre los llamados *complejos*, o conjuntos

de especies químicas que aparecen a la izquierda y a la derecha de cada paso de reacción.

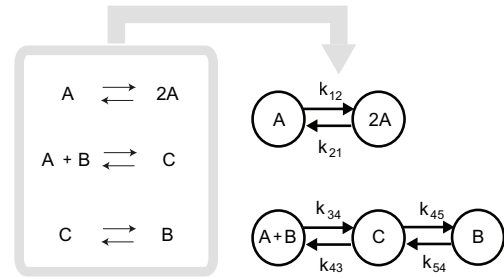


Figura 4. Mecanismo de Edelman y grafo asociado con $m = c = 5$. El grafo cuenta con dos componentes fuertemente conectados.

La relación entre los m complejos de una red y las especies químicas se recoge en una matriz $Y \in \mathbb{R}^{c \times m}$, cuyo componente y_{ij} es el coeficiente estequiométrico de la especie i en el complejo j . Cada complejo de la red es un nodo en el grafo, mientras que las reacciones irreversibles entre complejos se representan mediante flechas que conectan dichos nodos. Estas reacciones obedecen la *ley de acción de masas*; por lo tanto, cada complejo lleva asociada una función escalar de la forma:

$$\psi_i(x) = \prod_{j=1}^c x_j^{y_{ij}}, \quad (7)$$

así como un peso asociado a cada flecha que relaciona complejos (ver Figura 4) y que se corresponde con las constantes de reacción. Los "subgrafos aislados" que conforman una red se denominan *componentes*, y debido a la reversibilidad de la mayoría de mecanismos de reacción, son frecuentemente (en términos de teoría de grafos) *componentes fuertemente conectados*.

Siguiendo con el formalismo descrito, la dinámica de una red de reacciones se expresa mediante el conjunto de ecuaciones diferenciales:

$$\dot{x} = Y \cdot A_k \cdot \psi(x) \quad (8)$$

donde Y es la matriz estequiométrica, $\psi(x)$ es el vector de monomios (7) y A_k es una matriz construida a partir de la matriz de adyacencia del grafo (R) como:

$$A_k = R - \text{diag}(R^T \cdot \vec{1}) \quad (9)$$

Los balances de materia para cada radical o especie química fundamental \mathcal{C}_i ($i = 1, \dots, s$) satisfacen:

$$\mathcal{C}_i^0 = b_i^T \cdot x \quad \text{para } i = 1, \dots, s \quad (10)$$

donde los elementos del vector $b_i \in \mathbb{N}^c$ representan las unidades de \mathcal{C}_i en cada especie, y $\mathcal{C}_i^0 = b_i^T \cdot x_0$ con $x_0 = x(0)$. La intersección del ortante positivo (i.e. \mathbb{R}_+^c) con el conjunto de s leyes de conservación define el denominado *simplex de reacción*:

$$\Omega(x_0) = \{x \in \mathbb{R}_+^c / b_i^T(x - x_0) = 0, \quad i = 1, \dots, s\} \quad (11)$$

el cual representa un invariante para la dinámica de las reacciones del sistema equivalente a la región compacta Λ para el caso de las redes de proceso.

Es preciso destacar, por último, las posibilidades que pueden derivarse de las analogías existentes entre redes de reacción tal y como han sido formuladas en *CRNT* (Feinberg 1979), y las redes de proceso. Así, las redes de proceso participan de conexiones tanto reversibles (subredes disipativas) como irreversibles (subredes convectivas) en las que el flujo de propiedad extensiva (masa o energía) es proporcional al correspondiente valor de la propiedad intensiva. Por lo tanto, una vez establecidas las relaciones entre ambos tipos de redes, es posible hacer uso de los potentes resultados de estabilidad desarrollados en *CRNT* y orientarlos al estudio de redes de proceso.

3. APLICACIONES

3.1 Propiedades dinámicas en redes de reacción

En este apartado, y en el contexto de redes de reacción, se pondrá de manifiesto las estrechas relaciones existentes entre la estructura del grafo, estructura dinámica de la red (8) y la naturaleza de los puntos de equilibrio posibles.

3.1.1. Naturaleza de los posibles puntos de equilibrio en la red Tal y como se deduce de la expresión (8) para la evolución dinámica de una red de reacciones, una condición necesaria para que el punto x^* sea un estado estacionario es que, o bien el vector $\psi(x^*)$ pertenezca al espacio nulo de A_k , o bien el producto $A_k \cdot \psi(x^*)$ esté en el espacio nulo de Y . Por lo tanto, la región de posibles puntos de equilibrio $Y \cdot A_k \cdot \psi(x^*) = 0$ se relaciona con dos subespacios característicos. El primero de ellos es:

$$D_0 = \{z \in \mathbb{R}^m / A_k(z) = 0\} \quad (12)$$

cuya base generadora se compone de un número de vectores no negativos igual al número de *componentes* del grafo, satisfaciendo en el caso de *componentes fuertemente conectados*, que cada elemento $\{X_j\}_{j=1}^{\ell}$ de la base satisface $\varepsilon_i^T X_j > 0$ siempre que i pertenezca al componente j , y cero en el resto de los casos.

El segundo subespacio se define como:

$$D_\delta = \{z \in \mathbb{R}^m / z \in \text{Null}(Y) \cap \text{Im}(A_k)\} \quad (13)$$

cuya dimensión se conoce en la bibliografía como *deficiencia de la red*. Esta dimensión se calcula directamente a partir del grafo de la red de reacciones con la fórmula $\delta = m - \ell - \varsigma$, donde ℓ y ς denotan el número de *componentes* y la dimensión

del subespacio generador del *simplex de reacción*, respectivamente.

Una solución de equilibrio x^* del sistema (8) debe satisfacer, además de la pertenencia de $\psi(x)$ a uno de los subespacios descritos, la siguiente relación determinada por la *ley de acción de masas*:

$$\ln \psi(x) = Y^T \ln x \quad (14)$$

Resultados de la *CRNT* demuestran que cualquier solución positiva en $x \in D_0$ interseca al simplex de reacción exactamente en un punto, que resulta ser un punto de equilibrio asintóticamente estable. De hecho, el *Teorema de Deficiencia Cero* asegura que las redes cuya deficiencia es nula sólo aceptan soluciones en D_0 (el subespacio D_δ contiene sólo al vector nulo) y por lo tanto el equilibrio será único y asintóticamente estable, **independientemente de los valores que tomen los parámetros**. Por otro lado, las redes de reacción con deficiencia positiva pueden albergar multiplicidades u otros comportamientos complejos, asociados al subespacio D_δ .

3.1.2. Análisis de bifurcación Tal y como se ha expuesto en el apartado anterior, una propiedad estructural del grafo, denominada *deficiencia*, es determinante en el comportamiento dinámico de las redes de reacción. Esta propiedad se ha utilizado asimismo en la formulación de un **método para detectar bifurcaciones en redes de reacción** (Otero-Muras *et al.* 2006b) cuyas bases se enuncian brevemente a continuación, y que permitirá definir los distintos rangos de parámetros en donde aparece comportamiento complejo.

Como ya se ha indicado, una red de deficiencia nula corresponderá siempre a un sistema con un único punto de equilibrio asintóticamente estable, mientras que para una red con deficiencia no nula cualquier tipo de comportamiento complejo estará asociado al subespacio D_δ . Así, para las soluciones pertenecientes a (13) se cumple que:

$$A_k \cdot \psi(x) = \sum_{i=1}^{\delta} \alpha_i w_i \quad (15)$$

con $\alpha_i \in \mathbb{R}$ y $w_i \in \mathbb{N}^{+m}$. Utilizando las ecuaciones (14) y (15), la curva de soluciones se puede expresar en función de un nuevo conjunto de parámetros, que será el utilizado en el análisis de bifurcación. En este caso, el número de parámetros a variar es igual a la deficiencia de la red, que por lo general será un número bajo, incluso **órdenes de magnitud menor que el número de parámetros originales**.

Este método se ilustra sobre un ejemplo de red de reacciones conocido como mecanismo de Edelstein (ver Figura 4). La deficiencia de esta red es $\delta = 5 - 2 - 2 = 1$, y por lo tanto el análisis se hará

mediante la **variación de un solo parámetro**. La expresión de la curva parametrizada \mathcal{H} en función de α es:

$$\mathcal{H}(x, p, \alpha) = \begin{pmatrix} -p_1 x_1 + x_1^2 - \alpha \\ -p_2 x_1 x_2 + x_3 - \alpha \\ x_3 - p_3 x_2 + \alpha \end{pmatrix} \quad (16)$$

donde los parámetros originales se han agrupado en $p_1 = k_{12}/k_{21}$, $p_2 = k_{34}/k_{43}$ y $p_3 = k_{54}/k_{45}$.

De esta ecuación se deducen las expresiones representadas en la Figura 5 para x_1 , x_2 y x_3 en función de α , donde se observa que la solución $x \in \mathbb{R}^3$ existe sólo para $\alpha > \alpha_0$ con $\alpha_0 = -p_{12}/4$. Por otro lado, el lugar geométrico donde la derivada de la expresión (16) se hace cero ($p_3 = p_2 x_1$) determina el valor crítico para α^* que divide las regiones del espacio de parámetros con comportamiento cualitativo distinto. Del análisis mostrado en la Figura 6 se pueden descartar, dentro de cada región, los intervalos donde no hay soluciones positivas, y entre los intervalos donde hay soluciones positivas se comprueba si se cumple una condición necesaria para la existencia de multiplicidades. Dado que los puntos de equilibrio son intersecciones entre la curva de soluciones y el simplex de reacción, se establecen condiciones sobre las posiciones relativas entre el simplex y la curva para detectar el comportamiento complejo. En el caso de las multiplicidades, éstas ocurren siempre que se cumpla que $b^T \cdot (\mathcal{H}) = 0$ para algún α .

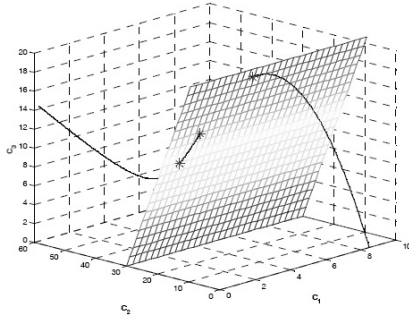


Figura 5. Multiplicidad de estados estacionarios (tres intersecciones entre la curva de soluciones y el simplex) para la red de Edelstein ($p_1 = 8.5$, $p_2 = 1$, $p_3 = 0.2$).

En este ejemplo, esta relación equivale a la condición $dx_2/d\alpha = 1/(1 + p_3) = -dx_3/d\alpha$, que sólo se cumple (como se deduce de la Figura 6) en la región III del espacio de parámetros (para valores de α entre 0 y α^*). El espacio de parámetros está, por lo tanto, dividido en tres regiones con comportamiento cualitativo distinto (Figura 6.d). Eligiendo arbitrariamente un conjunto de parámetros que pertenecen a R.III se comprueba (Figura 5) cómo las multiplicidades aparecen, de hecho, en esta región.

Se resalta por último la conveniencia de explorar procedimientos algoritmos de búsqueda de bifurcaciones basados en la metodología aquí expuesta.

3.2 Control descentralizado de redes de proceso

La metodología desarrollada en (Antelo *et al.* 2007a) permite el diseño sistemático de estructuras de control a partir del desarrollo de controladores descentralizados robustos que aseguran la estabilidad global de los *sistemas de proceso*. Para ello se combinan resultados previos que relacionan la termodinámica y la teoría de pasividad. Los ingredientes teóricos básicos de esta metodología fueron establecidos por Alonso e Ydstie (1996) en lo referente al diseño de control pasivo, así como en el contexto de sistemas distribuidos (Alonso y Ydstie 2001). Siguiendo una línea de argumentación similar, estos conceptos han sido aplicados al control de inventarios de materia y energía (Farschman *et al.* 1998). Finalmente, en (Antelo *et al.* 2007a, Antelo *et al.* 2007b) se aprovecha la estructura algebraica que subyace a cada red de proceso para definir una descomposición de la misma en redes fundamentales de materia y energía sobre las cuales se pueden definir, de forma sencilla, lazos conceptuales de control de inventario.

3.2.1. Control de inventario A partir de las Ecuaciones (4) y (5), se diseñan los controladores de inventario de materia y energía con los que asegurar que los estados de la red permanezcan en una región compacta Λ definida por inventarios constantes de la forma:

$$\Lambda(\mathcal{D}) = \left\{ (z_j, v_j)_{j=1}^n \left| \sum_{j \in \mathcal{D}} v_j = v; \sum_{j \in \mathcal{D}} u_j = u; \sum_{j \in \mathcal{D}} \sum_{k=1}^c \sigma^k n_j^k = m \right. \right\} \quad (17)$$

Puesto que es sobre esta región compacta donde la entropía alcanza un máximo para un volumen (ν), masa (m) y energía interna (u) total constante, ésta función (la entropía) se puede emplear como candidato a función de Lyapunov con la que diseñar esquemas de control descentralizado que de forma robusta aseguren la estabilidad de los inventarios de materia y energía (Alonso y Ydstie 1996, Alonso y Ydstie 2001). Dichos inventarios, que para cada nodo $j \in \mathcal{D}$ deben ser estrictamente positivos, esto es:

$$v_j > 0; u_j > 0; \sum_{k=1}^c \sigma^k n_j^k = m_j > 0 \quad \forall j \in \mathcal{D} \quad (18)$$

se regulan mediante controladores proporcionales de la forma:

$$\phi_{\mathcal{I}} = \phi_{\mathcal{I}}^* + \omega_m (m_{\mathcal{I}} - m_{\mathcal{I}}^*) ; p_{\mathcal{I}} = p_{\mathcal{I}}^* + \omega_u (u_{\mathcal{I}} - u_{\mathcal{I}}^*) \quad (19)$$

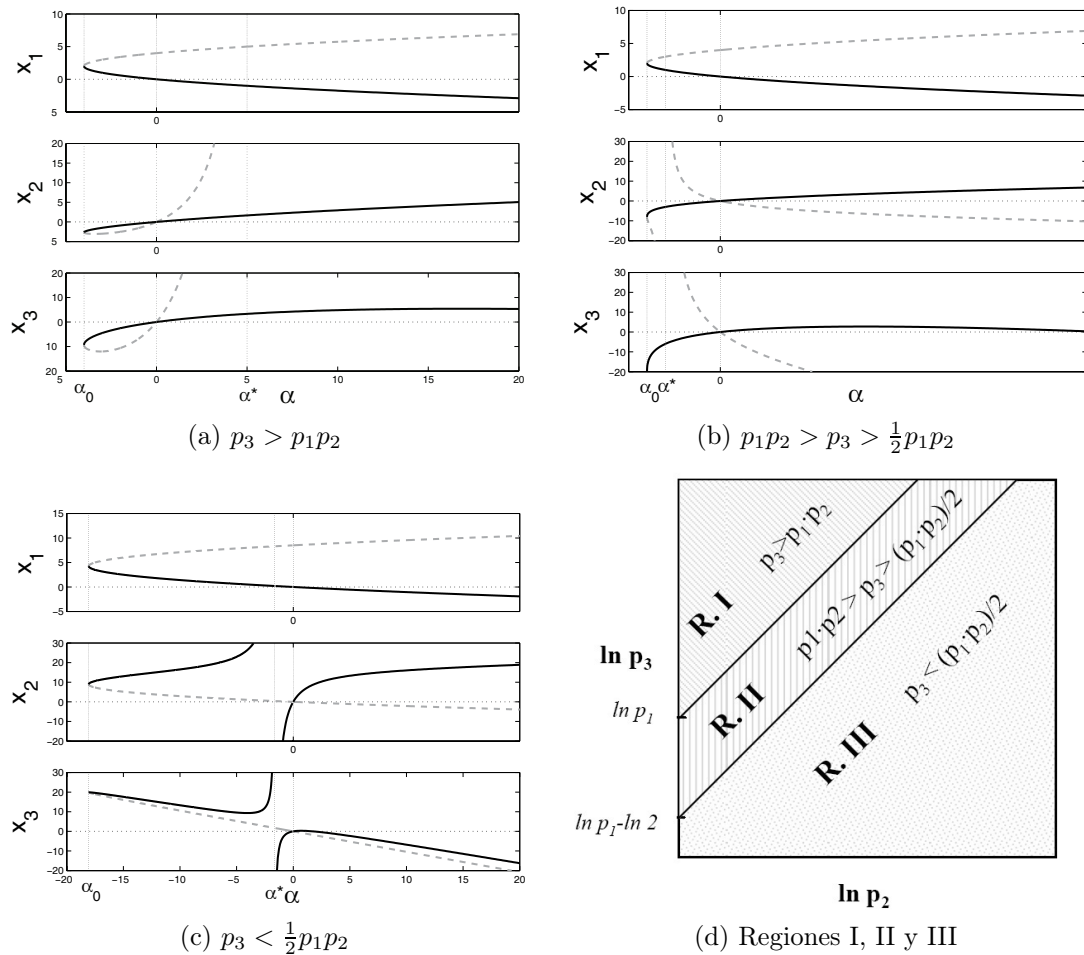


Figura 6. Soluciones de equilibrio como función de α para las tres regiones con comportamiento cualitativo distinto (R.I, R.II and R.III) representadas en (d) en escala logarítmica.

en los que ϕ_T^* pertenece al espacio nulo de \mathcal{N} , y ω_n, ω_u en (19) representan matrices de ganancias. A fin de asegurar convergencia exponencial, éstas se construyen de manera tal que la parte real de los autovalores asociados a $\mathcal{N}\omega_m$ y $\mathcal{N}\omega_u$ sea negativa. Mediante el diseño conceptual propuesto de los lazos de control de inventario, y teniendo en cuenta las Ecuaciones (4) y (5), se asegura la convergencia de los estados de la red a Λ -ver prueba de convergencia en (Antelo *et al.* 2007a)- y del mismo modo la estabilidad de las variables extensivas. Argumentos similares pueden emplearse para demostrar las estabilidad de controladores con términos proporcional e integral (Farschman *et al.* 1998)

3.3 Ejemplo de Aplicación: Control del Proceso Tennessee Eastman

Desde que Downs y Vogel publicaron en 1993 el Proceso Tennessee Eastman (cuyas siglas son TEP) (Downs y Vogel 1993), éste ha sido ampliamente utilizado en la bibliografía como banco de pruebas debido a sus múltiples posibilidades desde el punto de vista de la ingeniería de control: *es altamente no lineal, inestable en lazo abierto y pre-*

senta un elevado número de medidas y variables manipuladas, lo que permite un amplio conjunto de posibles estrategias de control. Por tanto, el TEP proporciona la oportunidad a los diseñadores de proponer y probar sus estrategias de control en una base comparable. Nuestro trabajo pretende la sistematización del método de diseño de estructuras de control a través del desarrollo de controladores descentralizados robustos que aseguren la estabilidad global del TEP.

La Figura 7 recoge el diagrama de flujo correspondiente al proceso TEP, destacándose la unidad de reacción (izquierda del diagrama) y separación (unidades *flash* y *stripper* a la derecha del diagrama) conectadas por un lazo de recirculación. Este diagrama se corresponde con la red de proceso mostrada en la Figura 8 en la que se integran la red de materia y energía. Cada fase presente en el proceso se representa mediante un círculo mientras que el entorno se denota por los círculos sólidos.

En este punto, es preciso recordar que a cada nodo j en la red se le asocia un vector de estados $z_j = (n_{1j}, \dots, n_{cj}, u_j)^T$, con $c = 8$ (número de especies químicas) en el TEP. Los nodos y el

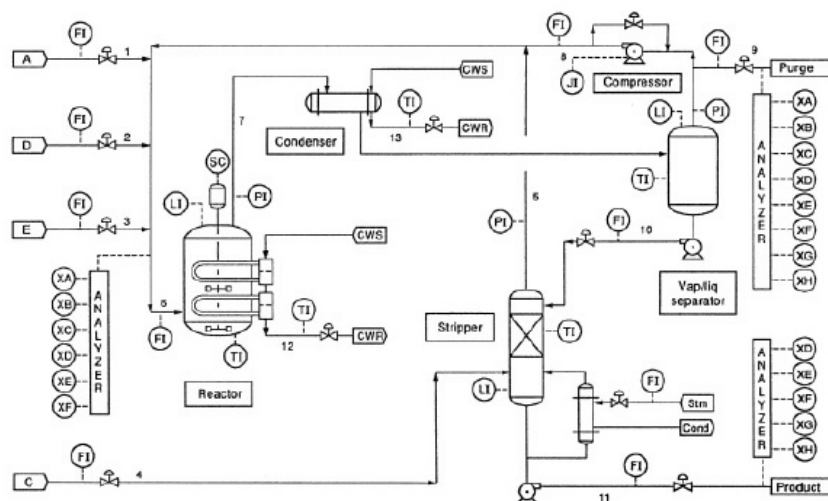


Figura 7. Diagrama de flujo correspondiente al Proceso Tennessee Eastman (TEP).

entorno se conectan a través de un conjunto de n flujos convectivos de componente y energía, respectivamente. Como ejemplo de la notación desarrollada en la Sección 2 para las redes de proceso, en la Figura 8 se muestra tanto el flujo convectivo de materia que abandona el nodo 1 (f_1) como el flujo de energía asociado a él ($p_1(f_1)$).

Los nodos en la red también pueden interconectarse a través de flujos disipativos de transferencia (debidos a potenciales termodinámicos) de materia y energía, los cuales están recogidos en los vectores φ^k y Ψ , respectivamente. Gráficamente, estos flujos disipativos se representan mediante dobles flechas continuas, en el caso de materia, y discontinuas, en el de energía. En la Figura 8 se detallan los vectores correspondientes a la transferencia de materia existente entre los nodos líquido y vapor en el reactor (φ), así como los correspondientes a la transferencia de calor entre el reactor y su camisa (Ψ). En este caso, el número total de conexiones disipativas de materia y energía es $d_c = 4$ y $d_u = 3$.

3.3.1. La descomposición de la red de procesos para el caso TEP El comportamiento no lineal asociado a la dinámica del TEP, y causante de la mayor parte de los problemas de estabilidad en el proceso Tennessee Eastman está relacionado, prácticamente en su totalidad, con las reacciones químicas que tienen lugar en el reactor. Por ello, parece conveniente la descomposición del proceso TEP en dos secciones o subredes que integren, por una parte, la zona de reacción, y por otra la de separación y recirculación a fin simplificar el procedimiento de diseño del control. En este sentido es importante destacar que asegurando, a través de estructuras de control, la pasividad de cada una de las subredes, se asegura al pasividad de la planta completa que, por lo tanto, será

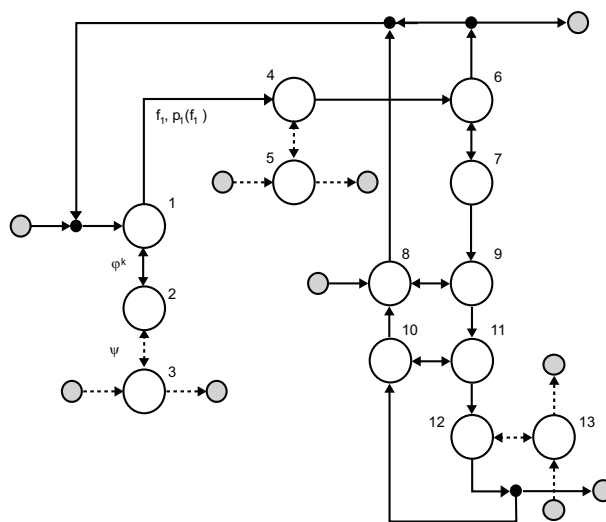


Figura 8. Red de Proceso del TEP

fácilmente estabilizable dado que la interconexión de sistemas pasivos preserva la pasividad del conjunto (Willems 1972).

A tal fin, la red de proceso correspondiente al TEP (Figura 8) se integra en una nueva red de inventarios constituida únicamente por dos nodos tal y como la mostrada en la Figura 9, los cuales representan las partes o secciones de reacción y separación del sistema. El nodo R denota la sección de reacción y el nodo S la sección de separación, respectivamente. Por otra parte, con una mayor grado de detalle, el nodo R puede representarse con una nueva subred de proceso (Figura 9) con dos niveles acoplados (materia y energía).

Del mismo modo se pueden construir subredes de materia y energía para el caso de la sección de separación, tal y como se muestra en la Figura 10. Nótese que en esta figura, la torre de destilación está representada por una unidad genérica

(condensador, plato de alimentación y calderín) que integra las diferentes fases vapor y líquidas del sistema. Una representación más realista de la columna sería aquella constituida por N subredes equivalentes correspondiente a cada uno de los platos de la columna de destilación. Sin embargo, y tal como se discute en la Sección 2.1, los intercambios en las subredes disipativas suceden en una escala de tiempo considerablemente menor que la de proceso por lo que pueden considerarse de equilibrio y así concentrar todos los nodos en la representación abreviada.

Sobre las secciones de reacción y separación, así definidas, será sobre las que se aplicará el procedimiento jerárquico de diseño de la estructura de control.

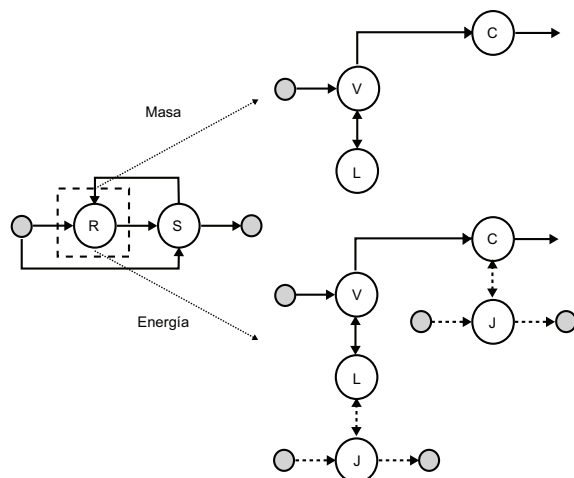


Figura 9. Red de proceso simplificada para el TEP junto con las subredes de materia y energía para la sección de reacción.

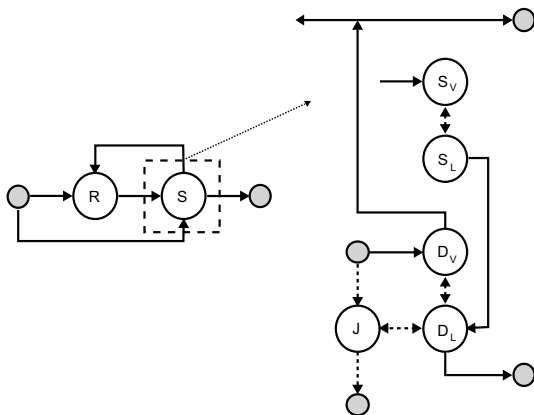


Figura 10. Subredes de materia y energía para la sección de separación. Los nodos S_L y S_V representan la fase líquida y vapor en el separador. Los nodos D_L y D_V representan la fase líquida y vapor para un plato genérico en la torre de destilación.

Una vez llevada a cabo esta descomposición, y tal y como se ha descrito en la sección anterior, para cada nodo de estas subredes se diseñan lazos de

control de inventario capaces de mantener a las variables extensivas acotadas en la región invariante y convexa definida por la Ecuación (17). En dicha región, la segunda ley de la termodinámica proporciona una función (la entropía del sistema) acotada superiormente, por lo que el sistema es pasivo. Dado que además puede demostrarse que esta función posee una curvatura definida (de hecho es cóncava), puede emplearse como base para la construcción de funciones de Lyapunov con las que diseñar esquemas de control estable (Alonso y Ydstie 2001)

Los lazos conceptuales de control de inventario desarrollados para las secciones de reacción y separación del proceso Tennessee Eastman se muestran en la Figura (11). Para el caso de la **sección de reacción** (Figura 9), y considerando el nivel de materia, es necesario mantener el inventario de materia en los nodos L y V . Para ello, el flujo total de inventario entrando en el nodo V se emplea como variable manipulada para controlar el inventario de masa en el nodo L , dado que no existe ningún flujo de salida en este nodo. Para el caso del nodo V -Figura (9)- el único grado de libertad disponible es su flujo de salida. Por tanto, el control de este inventario de materia en fase vapor debe realizarse mediante la combinación de un control de la presión (que emplea como variable manipulada este flujo de salida del nodo V) con el control de inventario de energía (el cual se lleva a cabo mediante el flujo de energía que abandona el nodo J).

Para el caso de la **sección de separación** (Figura 10) y, más concretamente, para el caso de la torre de destilación, se considera que los inventarios de materia y energía en cada una de las fases presentes en cada plato son *autorregulables* ya que se asume la condición de equilibrio así como de flujo molar constante. Por ello, nuestra atención se centra únicamente en el inventario de materia en el fondo de columna y en cada uno de los nodos del separador, utilizándose los flujos de salida de cada uno de éstos como variables manipuladas. Para el caso de los inventarios de energía, la válvula de vapor presente en el calderín podría emplearse para el control de dicho inventario en la columna.

En relación con el separador, nótese que su temperatura no puede manipularse de forma directa al no disponer de más corrientes de refrigeración o calefacción en dicha sección del proceso. Por ello, y como alternativa factible se propone el flujo de energía a la entrada del separador como candidato a variable manipulada.

El siguiente paso en el proceso de diseño lo constituye la realización de los lazos conceptuales de control de inventario, utilizando para ello las entradas y salidas físicas del proceso. El control de inventario, por sí mismo, no garantiza la con-

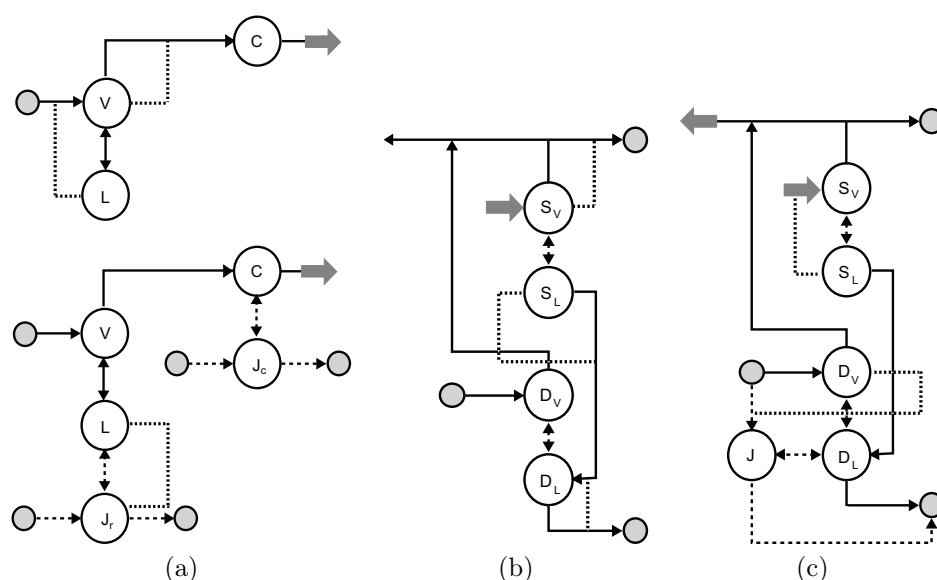


Figura 11. Lazos de control de inventario propuestos: a) Niveles de materia y energía para la sección de reacción; b) Nivel de materia para la sección de separación; c) Nivel de energía para la sección de separación.

vergencia de las variables intensivas a un punto de operación deseado. Así pues, son necesarios algunos lazos extra para asegurar esta convergencia. A este respecto, en (Antelo *et al.* 2007a) se proponen estructuras de control no lineal estables.

En este punto, es importante señalar que el procedimiento descrito no conduce a una única configuración descentralizada de control sino a un conjunto de alternativas de control con la particularidad de que todas ellas aseguran la estabilidad en el sentido entrada-salida de la planta. Puede, por lo tanto, considerarse como un procedimiento formal con el que definir el conjunto de todos los posibles candidatos de control descentralizado estables. Sobre este conjunto, puede elegirse aquella configuración óptima de acuerdo con un objetivo dado.

Es preciso indicar que en algunos casos los grados de libertad disponibles no son suficientes para implementar la estructura de control necesaria que garantice la convergencia tanto de las variables extensivas como de las intensivas. Es en estas situaciones donde puede resultar conveniente el empleo de las referencias de los controladores de inventario como nuevas variables manipuladas con las que completar el diseño de la estructura de control descentralizado.

Por último, resaltar que en aquellos procesos en los que están presentes reacciones químicas, esta estructura de control no tiene porqué asegurar la estabilidad de las variables intensivas, puesto que la alta no linealidad debida a la ley de acción de masas puede provocar comportamientos complejos tales como fenómenos oscilatorios o múltiples estados estacionarios (Otero-Muras *et al.* 2006a). En este contexto, la teoría CRNT, discutida en

la Sección 2, se revela como una herramienta de utilidad en la detección de comportamientos complejos. Asimismo, y en combinación con la sistemática expuesta, cabe plantearse su aplicación en el diseño de lazos de control extra que aseguren la estabilidad global tanto de las variables extensivas como de las intensivas.

4. CONCLUSIONES

En este trabajo se han propuesto las bases para una representación formal generalizada de los *sistemas de proceso*. Utilizando los conceptos desarrollados por los autores en trabajos previos (redes de proceso, redes de inventario, subredes disipativas y redes de reacciones), así como resultados de la termodinámica, la teoría de sistemas y la teoría de grafos, se establecen las jerarquías y se definen los protocolos a seguir para unificar los niveles dinámicos existentes en un proceso bajo una misma estructura formal. Asimismo, se demuestra cómo el uso de esta herramienta conceptual permite abordar diferentes problemas abiertos en el campo de la ingeniería de control: el análisis dinámico de sistemas a partir de propiedades gráficas como la *deficiencia*, el análisis de bifurcación mediante un nuevo método que permite reducir el número de parámetros críticos aprovechando propiedades estructurales de la red y el diseño sistemático de estructuras de control.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen la financiación recibida del Gobierno Español (Proyecto MCyT PPQ2001-

3643 y DPI2004-0744-C04-03) y de la Xunta de Galicia (PGIDIT02-PXIC40209PN).

REFERENCIAS

- Alonso, A.A., C.V. Fernandez y J.R. Banga (2004). Dissipative systems: From physics to robust nonlinear control. *International Journal of Robust and Nonlinear Control* **14**, 157–179.
- Alonso, A.A., J.R. Banga y B.E. Ydstie (2002). From irreversible thermodynamics to a robust control theory for distributed process systems. *Journal of Process Control* **12**(4), 507–517.
- Alonso, A.A., J.R. Banga y I. Sanchez (2000). Passive control design for distributed process systems: Theory and applications. *AIChE Journal* **46**(8), 1593–1606.
- Alonso, A.A. y B.E. Ydstie (1996). Process systems, passivity and the second law of thermodynamics. *Computers and Chemical Engineering* **20**, 1119–1124.
- Alonso, A.A. y B.E. Ydstie (2001). Stabilization of distributed systems using irreversible thermodynamics. *Automatica* **37**(11), 1739–1755.
- Angeli, D., Jr. Ferrel y J.E. Sontag (2004). Detection of multistability, bifurcations and hysteresis in a large class of biological positive-feedback systems. *PNAS* **101**(7), 1822–1827.
- Antelo, L.T., I. Otero-Muras, J.R. Banga y A.A. Alonso (2007a). A systematic approach to plant-wide control based on thermodynamics. *Computers and Chemical Engineering, en prensa*.
- Antelo, L.T., J.R. Banga y A.A. Alonso (2007b). Hierarchical design of decentralized control structures applied to the tennessee eastman process. *Enviado a Industrial and Chemistry Engineering Research*.
- Demirel, Y (2002). Nonequilibrium thermodynamics. *Elsevier: Amsterdam*.
- Downs, J.J. y E.F. Vogel (1993). A plant-wide industrial process control problem. *Computers and Chemical Engineering* **17**, 245–255.
- Farschman, C., K. Viswanath y B.E. Ydstie (1998). Process systems and inventory control. *AIChE Journal* **44**(8), 1841–1857.
- Feinberg, M. (1979). *Lectures on chemical reaction networks*. Mathematics Research Center, University of Wisconsin.
- Gorban, A.N., I.V. Karlin y A.Y. Zinovyev (2004). Invariant grids for reaction kinetics. *Physica A*.
- Hangos, K.M., A.A. Alonso, J.D. Perkins y B.E. Ydstie (1999). Thermodynamic approach to the structural stability of process plants. *AIChE Journal* **45**(4), 802–816.
- Otero-Muras, I., G. Széderkenyi, K.M. Hangos y A. A. Alonso (2006a). Dynamic analysis and control of biochemical reaction networks. *aceptado en: Mathematics and Computers in Simulation*.
- Otero-Muras, I., J.R. Banga y A.A. Alonso (2006b). A method for detecting bifurcations in biochemical networks. *Presentado en: International Symposium on Systems Biology (SYSBIOL-2006)*.
- Willems (1972). Dissipative dynamical systems. *Arch. Rational Mech. Anal.* **45**, 321–393.