



Efecto de las condiciones iniciales sobre la Controlabilidad de Estado en Procesos por Lotes

Pablo García Rivera

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Minas
Medellín, Colombia
2012

Efecto de las condiciones iniciales sobre la Controlabilidad de Estado en Procesos por Lotes

Pablo García Rivera

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Ingeniería Química

Directora:
Lina María Gómez Echavarría Ph.D.

Línea de Investigación:
Modelación y Control de Procesos
Grupo de Investigación:
KALMAN - Grupo de Investigación en Procesos Dinámicos

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Minas, Escuela de Procesos y Energía
Medellín, Colombia
2012

*Para Uge
(y su infinita paciencia)*

Agradecimientos

A mi asesora Lina María Gómez Ph.D. por su constante motivación, orientación y generosidad con el conocimiento.

A mis compañeros y profesores del Grupo de Investigación en Procesos Dinámicos de la Universidad Nacional de Colombia, encabezado por Hernán Darío Álvarez Ph.D., por crear un ambiente académico abierto, creativo y riguroso.

A mis compañeros y profesores del Grupo de Investigaciones Ambientales de la Universidad Pontificia Bolivariana, encabezado por Victoria Toro Ph.D., por darme la oportunidad de trabajar por el desarrollo de mi ciudad, Medellín y a la vez continuar mi formación académica.

A mis amigos de ayer y de hoy: Pablo, Ana María, Lucas, Lina y Jose, que han vivido este proceso conmigo y en especial a Dani, quien ha sido mi apoyo constante.

A mi toda mi familia, en especial a mi padre Rafael y mi abuelo Gilberto, ingenieros de la Facultad de Minas, cuyo legado sigo con orgullo.

Resumen

Los Procesos por Lotes son un modo de producción de gran importancia industrial cuyo uso está en aumento debido a su gran flexibilidad, sin embargo, el análisis formal de los Procesos por Lotes desde la teoría de control es un área naciente debido a que la teoría de control clásica solo es aplicable a aquellos procesos que trabajan al rededor de un punto de equilibrio, es decir, procesos continuos. En esta tesis se se aplican las definiciones de controlabilidad de estado desde la teoría de conjuntos al estudio de la influencia de las condiciones iniciales en los procesos por lotes, de tal forma que se garantice una controlabilidad de estado óptima por medio del uso del hipervolumen de controlabilidad como indicador de controlabilidad de estado.

Palabras clave: Procesos por lotes, controlabilidad, sistemas no lineales.

Abstract

Batch processes are a production method of great industrial importance that has seen increased use due to their flexibility, however, formal analysis of batch processes is a nascent area because classical control theory is only applicable to processes that operate around an equilibrium point, that is, continuous processes. In this thesis, set theoretical definitions regarding state controllability are applied to the study of the influence of initial conditions on batch processes, in such a way that an optimal state controllability can be obtained by using the controllability hypervolume as an state controllability indicator.

Keywords: Batch processes, controllability, non linear systems

Índice general

Agradecimientos	vii
Resumen	ix
1. Introducción	1
2. Generalidades de los procesos por lotes	3
2.1. Definición de proceso por lotes	3
2.2. Procesos por lotes y procesos continuos	5
2.2.1. Operación del sistema	5
2.2.2. Condiciones de operación	5
2.2.3. Objetivo de control	5
2.2.4. Reproducibilidad	6
2.2.5. Flexibilidad	6
2.2.6. Productividad	6
2.2.7. Diseño de equipos	6
2.2.8. Costos de capital	7
2.3. Procesos por lotes en las industrias	7
2.4. Características de los procesos por lotes	9
2.4.1. Punto de operación variante en el tiempo	9
2.4.2. Estructura dinámica variante en el tiempo	10
2.4.3. Operación restringida	10
2.4.4. Comportamiento irreversible	10
2.4.5. Perturbaciones internas	10
2.4.6. Dificultad para el manejo de no linealidades	10
2.4.7. Mayores requerimientos para el elemento final de control	11
2.4.8. Medidas poco precisas asociadas a la falta de sensores y a la amplitud del rango de operación	11
2.4.9. Alta flexibilidad	11
2.4.10. Cambio de los efectos de las acciones correctivas en el tiempo	11
2.5. Modelizado de procesos por lotes	12
3. Irreversibilidad y Controlabilidad de Estado en procesos irreversibles	13
3.1. La irreversibilidad en procesos por lotes	13
3.2. Controlabilidad de estado	14
3.2.1. Controlabilidad de estado desde la teoría de conjuntos	14
3.2.2. Conjunto de trayectorias controlables	16

3.3.	Indicadores de controlabilidad de estado para procesos por lotes	17
3.4.	Cálculo del hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$	20
3.4.1.	Discretización temporal	20
3.4.2.	Cálculo de los conjuntos Alcanzable ($\mathcal{R}(\Omega_0)$) y Controlable ($\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$)	20
3.4.3.	Discretización del espacio de estados admisibles, \mathcal{X}	22
3.4.4.	Cálculo del conjunto de trayectorias controlables en i , $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$	23
3.4.5.	Cálculo del hipervolumen de $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$, $\eta_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$	23
3.4.6.	Cálculo de una aproximación discreta del hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$	25
4.	Condiciones iniciales con controlabilidad de estado óptima en procesos por lotes	26
4.1.	Efecto de las condiciones iniciales sobre el comportamiento dinámico de los procesos por lotes	26
4.1.1.	Condiciones iniciales e irreversibilidad en procesos por lotes	26
4.1.2.	Efecto de las condiciones iniciales desde la teoría de conjuntos	26
4.2.	Condiciones iniciales con controlabilidad de estado óptima	29
4.2.1.	Restricciones a las condiciones iniciales	29
4.2.2.	Planteamiento de la función objetivo	30
4.2.3.	Selección de un algoritmo de optimización	31
4.3.	Cálculo de las condiciones iniciales con controlabilidad de estado óptima	31
5.	Ejemplo Ilustrativo: El reactor por lotes de J. Lee y Lee (2000)	33
5.1.	Restricciones y parámetros del sistema	33
5.2.	Cálculo de las condiciones iniciales con controlabilidad de estado óptima, Ω_0^*	34
5.2.1.	Determinación de la cota de Chernoff s , el número de particiones k y b , y el hipervolumen del espacio de estados admisibles $\eta_{\mathcal{X}[0, t_f]}$	35
5.2.2.	Cálculo de los conjuntos controlables $\mathcal{C}_i(\Omega_{t_f})$	35
5.2.3.	Cálculo de los conjuntos alcanzables $\mathcal{R}_i(\Omega_0)$	35
5.2.4.	Cálculo del hipervolumen de controlabilidad para Ω_0 , $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ y la función objetivo, $J(\Omega_0)$	38
5.2.5.	Optimización de $J(\Omega_0^p)$ para el cálculo de Ω_0^*	38
5.3.	Resultados	42
6.	Conclusiones y trabajos futuros	43
6.1.	Conclusiones	43
6.2.	Trabajos futuros	44
	Referencias	46
A.	El proceso de fermentación de la penicilina	50
B.	Modelo de un reactor por lotes (J. Lee y Lee, 2000)	51
C.	Optimización por quimiotactismo bacteriano	53

Índice de figuras

2.1. Esquemas de procesos continuos y por lotes	4
2.2. Esquemas de procesos semi-lote	4
3.1. Conjunto alcanzable en el tiempo t desde el conjunto Ω_τ , $\mathcal{R}_t(\Omega)$	16
3.2. Conjunto controlable $\mathcal{C}_t(\Omega_\tau)$ hacia Ω_τ en el tiempo t	17
3.3. Conjunto de trayectorias controlables desde Ω_0 a Ω_{t_f} , $\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})$	18
3.4. Discretización del espacio de estados admisibles \mathcal{X} y evaluación de la función de pertenencia $I_\Omega(\mathbf{b})$	23
3.5. Hipervolumen de $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$, $\eta_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$	24
4.1. Efecto de las condiciones iniciales en la evolución del proceso de producción de penicilina	27
4.2. Evolución temporal del conjunto alcanzable $\mathcal{R}_t(\Omega_0)$ para dos condiciones iniciales diferentes	28
5.1. Evolución temporal del conjunto controlable $\mathcal{C}_t(\Omega_{t_f})$	36
5.2. Evolución temporal del conjunto controlable $\mathcal{R}_t(\Omega_0)$	37
5.3. Evolución temporal de $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$, $\mathcal{R}(\Omega_0)$ y $\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})$	39
5.4. Evolución temporal del conjunto controlable $\mathcal{R}_t(\Omega_0^*)$	40
5.5. Evolución temporal de $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$, $\mathcal{R}(\Omega_0^*)$ y $\mathcal{T}(\Omega_0^*, \Omega_{t_f})$	41
B.1. Reactor por lotes con chaqueta de enfriamiento	52

Nomenclatura

C_A	Concentración del compuesto A en el reactor [$\frac{mol}{l}$]
T	Temperatura del reactor [K]
T_j	Temperatura de la chaqueta de regulación de temperatura del reactor [K]
c	Número de particiones en cada estado
k	Número de particiones en el tiempo
m	Número de acciones de control
n	Número de estados
s	Número de muestras para un algoritmo aleatorizado
t	Instante en el tiempo
t_f	Tiempo final del lote
\mathbf{u}	Vector de acciones de control
\mathbf{x}	Vector de estados
\mathbf{b}	Índice de posición de las particiones de \mathcal{X}
\mathbf{c}	Vectores de estado pertenecientes al conjunto controlable
\mathbf{r}	Vectores de estado pertenecientes al conjunto alcanzable
\mathbb{R}	Conjunto de los números reales
$\mathcal{B}_{\mathbf{b}}$	Partición del espacio de estados admisibles en \mathbf{b}
$\mathcal{C}_t(\Omega_\tau)$	Conjunto controlable en el tiempo t hacia el conjunto Ω_τ
$\mathcal{R}_t(\Omega_\tau)$	Conjunto alcanzable en el tiempo t desde el conjunto Ω_τ
$\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})$	Conjunto de trayectorias controlables desde Ω_0 a Ω_{t_f}
\mathcal{U}	Conjunto de acciones de control admisibles
\mathcal{X}	Conjunto de estados admisibles

$I_{\Omega}(\mathbf{b})$	Función de pertenencia del conjunto Ω en la partición \mathbf{b}
$I_{\Omega}(\mathbf{x})$	Función de pertenencia del conjunto Ω en \mathbf{x}
f	Sistema no lineal
Ω	Conjunto genérico
δ	Probabilidad de fallo para un algoritmo aleatorizado
$\eta_{\mathcal{B}_b}$	Hipervolumen de la partición del espacio de estados admisibles en \mathbf{b}
$\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$	Hipervolumen de controlabilidad
ϕ	Trayectoria de solución de un sistema no lineal
τ	Instante en el tiempo
ε	Error para un algoritmo aleatorizado

1. Introducción

Un proceso por lotes es aquel en el que una unidad de procesamiento se carga con una cantidad finita de materia prima. En esta unidad de procesamiento se realiza una serie de operaciones durante un tiempo predeterminado. Luego de cumplirse el tiempo, la materia prima procesada se descarga y pasa a una operación siguiente o es almacenada. La operación completa entre la carga y la descarga de la unidad de procesamiento es lo que se denomina lote. Desde el punto de vista dinámico, los procesos por lotes pueden considerarse como sistemas dinámicos no lineales, irreversibles, sujetos a restricciones, con incertidumbre y punto de operación variante en el tiempo (Bonvin, 1998; Russell, Robertson, Lee, y Ogunnaike, 2000).

Los Procesos por Lotes son una forma natural de llevar los procesos del laboratorio a la planta de producción. A medida que las capacidades de producción crecen, muchos Procesos por Lotes son convertidos en procesos continuos. Sin embargo, muchos procesos han cambiado de grandes plantas de producción continua a plantas de producción por lotes de múltiples productos para ajustarse con mayor facilidad a las cambiantes condiciones del mercado a (Bonvin, 1998); adicionalmente, en muchas aplicaciones se prefiere la forma de operación por lotes, tales como: la industria farmacéutica, la fabricación de polímeros y en general los bioprocesos.

Debido a la creciente importancia comercial de los procesos por lotes es conveniente analizarlos formalmente desde la teoría de control; no obstante, los formalismos de controlabilidad y de estabilidad establecidos en la teoría de control clásica solo son aplicables a aquellos procesos que trabajan alrededor de un punto de equilibrio, es decir, procesos continuos. Para solucionar este problema Srinivasan y Bonvin (2007) plantearon definiciones de estabilidad y de controlabilidad entrada-salida para Procesos por Lotes. Sin embargo, en la controlabilidad entrada-salida se pierde información relevante del comportamiento dinámico del proceso, pues no considera la evolución de los estados del sistema durante la duración del lote.

De acuerdo con lo anterior, es pues necesario caracterizar la controlabilidad de estado, ya que es la propiedad que permite determinar si efectivamente existe una acción de control admisible que garantice la evolución del sistema desde una condición inicial a una condición final deseada; además, garantizar la posibilidad de retornar a la condición deseada (L. M. Gómez, Álvarez, Peña, y di Sciascio, 2008). Dado que la teoría de control clásica no permite abordar la controlabilidad de estado para procesos irreversibles, como los procesos por lotes, en los trabajos de C. A. Gómez (2010); L. M. Gómez et al. (2008) se ha abordado la controlabilidad de estado de procesos por lotes desde el paradigma de la teoría de conjuntos (Blanchini y Miani, 2008; Bravo, Limon, y Alamo, 2005).

Existen además otras características que diferencian a los procesos continuos de los procesos por lotes y que deben considerarse en su análisis dinámico y por tanto en la controlabilidad de estado; estas son: el tiempo de duración del lote y el efecto de las condiciones iniciales.

Éste último aspecto se debe al carácter irreversible de los procesos por lotes. En [C. A. Gómez \(2010\)](#) se observa como una disminución en el tiempo de lote, afecta negativamente la controlabilidad de estado del proceso. No obstante, las condiciones iniciales son con frecuencia la perturbación principal en los Procesos por Lotes ([Russell et al., 2000](#)), por ejemplo: cambios de madera en digestores de pulpa o cambios en la pureza del monómero en reactores de polimerización, las cuales afectan considerablemente la controlabilidad de estado y cuya caracterización no ha sido abordada formalmente.

Por lo anterior en este trabajo se aplican las definiciones de controlabilidad de estado desde la teoría de conjuntos, desarrolladas por [C. A. Gómez \(2010\)](#); [L. M. Gómez \(2009\)](#); [L. M. Gómez et al. \(2008\)](#), para evidenciar la influencia de las condiciones iniciales sobre la dinámica de los procesos por lotes. Con este soporte se plantea una metodología para seleccionar las condiciones iniciales de un proceso por lotes que garanticen una controlabilidad de estado óptima por medio de un algoritmo de optimización basado en la definición del hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ como indicador de controlabilidad de estado.

2. Generalidades de los procesos por lotes

Los Procesos por Lotes son una forma natural de llevar los procesos del laboratorio a la planta de producción. A medida que las capacidades de producción crecen, muchos Procesos por Lotes son convertidos en procesos continuos. Sin embargo, muchos procesos han cambiado de grandes plantas de producción continua a plantas de producción por lotes de múltiples productos para ajustarse con mayor facilidad a las cambiantes condiciones del mercado (Bonvin, 1998). En este capítulo se presenta una definición de procesos por lotes, comparándolos con los procesos continuos y se describen sus características relacionadas con el control de procesos. Finalmente se describen las principales estrategias para la modelización de procesos por lotes.

2.1. Definición de proceso por lotes

En términos generales se denomina proceso a la secuencia de actividades químicas, físicas o biológicas destinadas a la conversión, transporte o almacenamiento de materia o energía. En la industria química, los procesos típicamente se clasifican como continuos o por lotes (*batch*) dependiendo de si las entradas y salidas aparecen como flujos continuos o en cantidades finitas de materia (Figura 2.1).

En un proceso continuo, los materiales se transportan en un flujo continuo a través de los equipos. Una vez alcanzado el estado estacionario, el proceso es independiente del tiempo de operación. Los procesos por lotes son aquellos en los que se producen cantidades finitas de una materia de salida (producto) a partir de unas cantidades finitas de materiales de entrada (materia prima) por medio de un conjunto ordenado de actividades de proceso, en un periodo finito de tiempo usando uno o más equipos. Típicamente un Proceso por lotes incluye la carga del material en el proceso, el procesamiento del material, la descarga del producto final y la preparación del siguiente lote.

Además de los procesos continuos y por lotes, es común encontrar combinaciones de ambos conocidos como procesos semi-lote (*semibatch*), en los cuales se adiciona continuamente uno o varios materiales de entrada o energía sin salida de producto, o se remueve continuamente producto sin la adición de material de entrada (Figura 2.2) (Srinivasan, Palanki, y Bonvin, 2003). Aunque estos procesos tienen características tanto continuas como discontinuas, generalmente se incluyen dentro de la categoría de los procesos por lotes ya que su comportamiento temporal se asemeja más a esta clase de procesos. Cuando se habla de equipos de procesamiento, es común utilizar el término *unidad semi-continua* para referirse a un equipo continuo que opera en forma intermitente transfiriendo el material entre dos unidades *batch*.

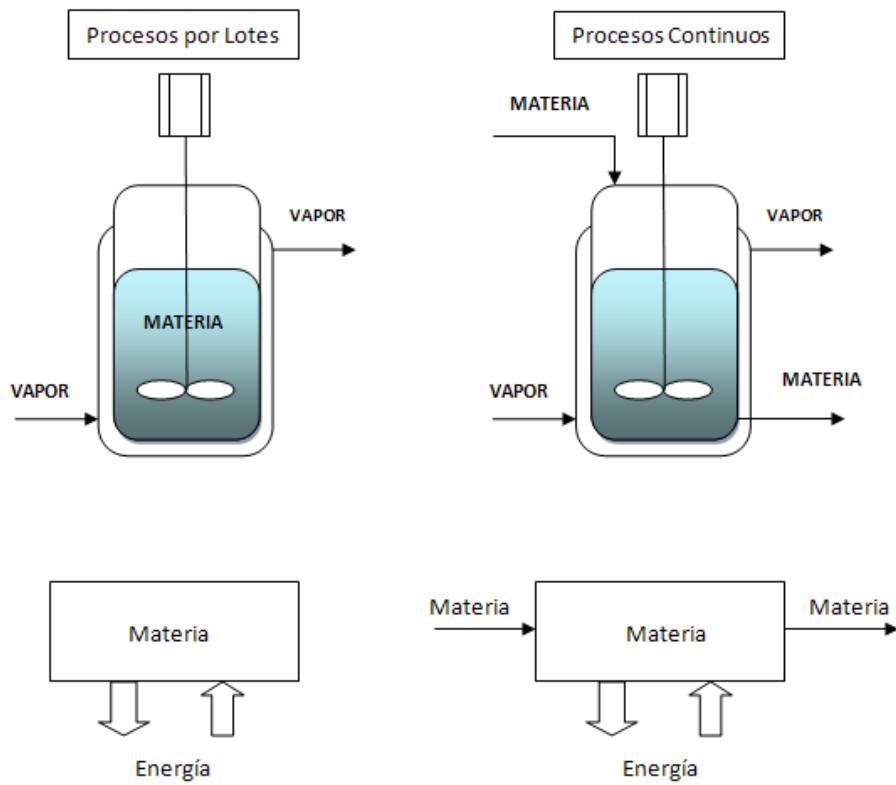


Figura 2.1.: Esquemas de procesos continuos y por lotes

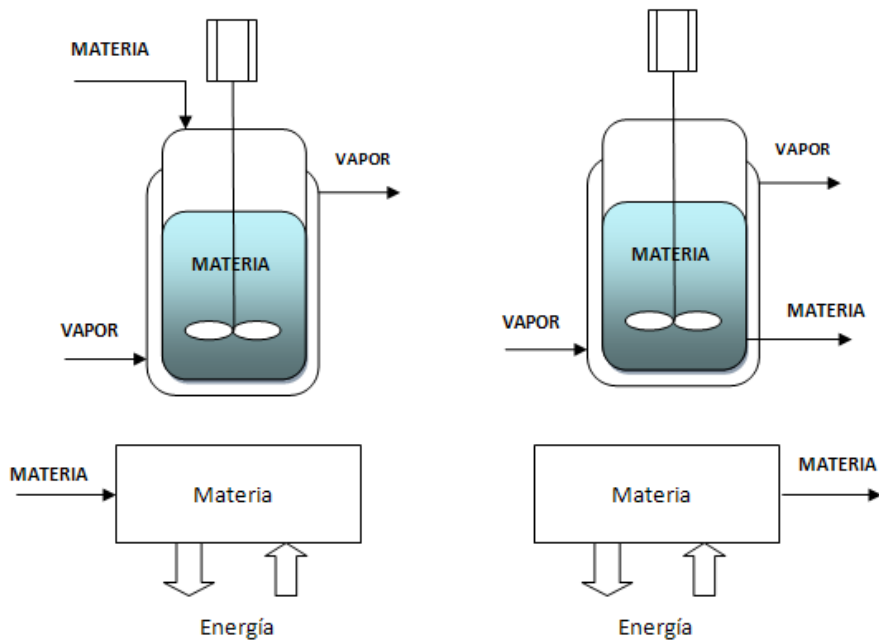


Figura 2.2.: Esquemas de procesos semi-lote

2.2. Procesos por lotes y procesos continuos

A continuación se enumeran las principales diferencias entre los procesos continuos y los procesos por lotes.

2.2.1. Operación del sistema

Procesos continuos Tiene lugar tanto una entrada como una salida de material, de modo que el volumen operativo permanece constante y la materia se está renovando continuamente. No existe un tiempo predefinido de arranque y parada; una vez se alcanza el estado estacionario, el proceso se vuelve independiente del tiempo, lo que significa que la conformidad del producto no se ve influida por el tiempo que el proceso lleve operando.

Procesos por lotes Un proceso por lotes tiene predeterminados los puntos de comienzo y parada de la operación. Las materias primas son introducidas dentro del proceso en cantidades predefinidas y procesadas a través de una secuencia específica de actividades conocida como *receta*.

2.2.2. Condiciones de operación

Procesos continuos En los procesos continuos los equipos trabajan alrededor de unas condiciones estacionarias de operación.

Procesos por lotes Están siempre asociados a un comportamiento transitorio, por lo que las condiciones de operación son no-estacionarias; es decir, variables con el tiempo.

2.2.3. Objetivo de control

Procesos continuos El objetivo de un sistema de control es mantener el sistema en un punto de ajuste específico (Regulación).

Procesos por lotes El objetivo del sistema de control debe ser mantener las características del producto final alrededor de las especificaciones, guiando las variables de proceso a lo largo de trayectorias factibles, que garanticen el cumplimiento de las restricciones y no comprometan la seguridad del sistema. Para lograr este objetivo, generalmente se determina cuales son las trayectorias que deben seguir las variables medibles y se implementa el sistema de control para seguir dichas trayectorias; sin embargo, en los últimos años se han desarrollado técnicas de control de producto final en las que punto a punto se vuelven a calcular las trayectorias que permitirán alcanzar las especificaciones finales con un mínimo margen de error ([Azimzadeh, Gala, y Romagnoli, 2006](#); [K. S. Lee y Lee, 2003](#); [Russell, Robertson, y Lee, 1998](#)).

2.2.4. Reproducibilidad

Procesos continuos Alta reproducibilidad bajo las mismas condiciones de operación. Es por esto que controlar la calidad de producto equivale a controlar los estados en un punto de ajuste para este tipo de procesos.

Procesos por lotes Falta de homogeneidad del producto final obtenido para las mismas condiciones de operación (temperatura, presión, etc.) debido, por ejemplo, a incertidumbre en las condiciones de arranque ([Bonvin, 1998](#)).

2.2.5. Flexibilidad

Procesos continuos Las plantas continuas deben dedicarse a la elaboración de productos altamente estandarizados y afrontar económicamente las variaciones del mercado. Existe poca flexibilidad en cuanto a las condiciones de operación, debido a que para alcanzar nuevamente el estado estable se requiere el desperdicio de grandes cantidades de materia prima, producto fuera de especificación y energía, con largos períodos de arranque y puesta a punto.

Procesos por lotes Esta es una de las ventajas claves de este tipo de procesos. Se adaptan más fácilmente a ambientes dinámicos de mercado que los procesos continuos. La posibilidad de ajuste les permite a las plantas de procesamiento por lotes ser multi-producto (producción de varios tipos de productos a través del mismo tren de equipamiento y la misma secuencia de actividades) y/o multi-propósito (producción de varios tipos de productos a través de unidades y secuencias variables), y acomodarse a las necesidades específicas del consumidor ([Salomone y Montagna, 1997](#)).

2.2.6. Productividad

Procesos continuos La productividad debe ser constante y siempre máxima.

Procesos por lotes La productividad en los procesos por lotes esta determinada por el tiempo de proceso y el tamaño del equipo de proceso. Además, se ve afectada por los tiempos muertos provenientes de los períodos de arranque y parada.

2.2.7. Diseño de equipos

Procesos continuos Diseñados para producir productos específicos. Los procesos continuos tienen como principal ventaja la economía de escala. La producción de grandes volúmenes de un producto estándar generalmente proporciona una buena recuperación del capital invertido. Dado que los requerimientos de productos no cambian significativamente, el proceso necesitará mínimas modificaciones durante su vida de trabajo para mantenerse competitivo.

Procesos por lotes Diseñados para ser capaz de producir varios productos. Por eso se utilizan mayoritariamente en la industria alimentaria y farmacéutica, donde es muy importante ofrecer una gran variedad de productos e introducir otros nuevos rápidamente, ya que estos sectores industriales operan en mercados altamente competitivos. También se utilizan cuando existe poca información disponible para el diseño, cuando la producción de todo el año puede obtenerse con unos pocos días de operación y en las pequeñas industrias, donde muchos de los productos que podrían ser manufacturados en plantas continuas, se producen por lotes por razones económicas.

2.2.8. Costos de capital

Procesos continuos Tienen menores costos de operación (mano de obra y energía) pero altos costos de capital. La construcción y puesta en marcha de plantas de producción continua tiene altos costos.

Procesos por lotes Requieren un alto número de operaciones discretas (preparación, carga, descarga), lo que puede resultar en altos costos operativos. La construcción de plantas por lotes tiene costos de capital bajos dado que un solo tren de equipos puede producir una gran cantidad de productos. Además, es económicamente viable construir plantas por lotes de pequeñas capacidades.

2.3. Procesos por lotes en las industrias

A pesar de la ventajas en productividad de los procesos continuos, los procesos por lotes son preferibles sobre los procesos continuos cuando se requiere de una mayor flexibilidad de los equipos, cuando la producción es pequeña o cuando la química y la cinética del proceso no permite un tratamiento en continuo. La Tabla 2.1 resume aquellos factores por los que se puede seleccionar un proceso por lotes o un proceso continuo. En general los procesos de gran escala usan operaciones continuas, mientras que los procesos de baja escala usan operaciones por lotes o semi-lotes. Una regla heurística sugiere que producciones anuales de más de 500.000 kg son económicamente más eficientes cuando se hacen en procesos continuos. Cuando ciertos productos tienen una demanda que cambia por temporadas, se debe decidir entre enfrentar el escalado de su producción o almacenar el producto que sobra en ciertas temporadas para completar las temporadas de mayor demanda; si se utilizan procesos por lotes, la variabilidad de la producción es más sencilla de manejar. Los procesos continuos generalmente no admiten una operación con mucha flexibilidad. La característica de los procesos por lotes de poder producir diferentes productos en una sola unidad, establece una ventaja fundamental de los procesos por lotes sobre los continuos, pues permite que la planta sea más versátil y se pueda acomodar fácilmente a los requerimientos del mercado.

Procesos que requieren muchos pasos repetitivos pueden requerir menos equipos cuando se diseñan con operaciones por lotes que cuando se diseñan con operaciones continuas. Por ejemplo un proceso de síntesis química con múltiples pasos puede requerir varias unidades si se opera en continuo, tantas como pasos tenga la síntesis, mientras que si se opera por lotes, puede ser necesario solamente un equipo. En algunos casos los equipos diseñados para hacer

Tabla 2.1.: Factores para seleccionar un proceso por lotes o un proceso continuo

Procesos por lotes	Procesos continuos
Volumen de producción bajo	Volumen de producción alto
Volumen de producción altamente variable	Volumen de producción constante o poco variable
Productos de alta pureza y calidad (ej. Farmacéuticos)	Productos con características estándar
Operaciones con múltiples productos, mayor flexibilidad de los equipos	Operaciones con un solo producto
Variables de proceso sujetas a ajustes	Condiciones de operación invariantes
Gran cantidad de etapas y subprocesos	Pocas etapas y procesos
Cinéticas de reacción lentas	Cinéticas de reacción rápidas

operaciones continuas pueden ser más costosas que los equipos de operaciones por lotes, por ejemplo los filtros rotatorios a vacío frente a un equipo de filtración por lotes. Otra ventaja fundamental de los procesos por lotes es la posibilidad de hacer un mantenimiento de los equipos más sencillo y económico que en procesos continuos.

En un proceso determinado pueden existir equipos tanto continuos como por lotes; sin embargo, aquellas industrias que manejan bajos volúmenes de producción o que requieren de un alto grado de pureza utilizan preferencialmente procesos por lotes. Uno de los sectores que requiere de estas características es el sector farmacéutico; los productos de este sector requieren de métodos muy específicos para obtener un medicamento con las concentraciones requeridas para el tratamiento de un paciente. Además son productos que pueden cambiar de demanda por temporadas. Algunas industrias que producen químicos específicos a través de muchos pasos para la síntesis de un compuesto, prefieren los procesos por lotes, pues evita tener varios equipos para hacer un sólo producto. La flexibilidad de los procesos por lotes les garantiza realizar varios pasos en un sólo equipo ahorrando espacio dentro de la planta.

En el sector biotecnológico, los procesos por lotes en algunos casos son equipos obligados, ya que, debido a la cinética lenta de las reacciones biológicas, el diseño de equipos en continuo da como resultado equipos de tamaños excesivos, además las fermentaciones y la purificación de compuestos biotecnológicos necesitan de un mantenimiento constante, pues la de contaminación puede llevar a la pérdida masiva de producto. En una operación continua el mantenimiento de los equipos implica altos costos mientras que en procesos por lotes el mantenimiento es sencillo. Un procesos por lotes permite entonces ahorrar espacio y costos de capital.

Por otra parte, la industria de polímeros necesita con frecuencia productos con diferentes características, por ejemplo: la diferente manipulación en un proceso de polimerización puede llevar a un producto con diferente viscosidad, factor de ruptura, rigidez, color, entre otros. Este tipo de industria manejar múltiples productos en una operación continua, implica cambiar las condiciones de operación para obtener un producto con características diferentes lo que conduce a altos costos y perdida de producto, mientras que en operación por lotes,

el cambio no causa más pérdidas en tiempos de producción y costos de operación que la operación mono-producto y evita la pérdida masiva de materia prima durante el proceso del cambio.

El sector alimentario también tiene una preferencia por los procesos por lotes, pues el peligro de la contaminación de alimentos requiere un constante mantenimiento de los equipos. Estas operaciones de mantenimiento son menos costosas en equipos que operan por lotes que en operaciones continuas. Finalmente, la industrias que manipulan y operan con sólidos pueden preferir equipos que operan por lotes, ya que este tipo de unidades son menos costosas y más pequeñas que los equipos que operan en continuo.

Es evidente entonces la cantidad de aplicaciones que tienen los procesos por lotes y la necesidad de desarrollar una teoría de control que los describa adecuadamente. Las industrias ven en el control y la automatización la oportunidad de mejorar la seguridad, la productividad, la calidad del producto y el escalado. Cabe notar que las principales características de los procesos por lotes pueden aprovecharse y potenciarse con el control y la automatización, además, algunas desventajas podrían atenuarse mediante un buen sistema de control; sin embargo, esta no ha sido una tarea sencilla desde el punto de vista académico e industrial, pues existen características que son serias dificultades para el control de este tipo de procesos.

2.4. Características de los procesos por lotes

En esta sección se describen las características más relevantes de los procesos por lotes a la luz del control ([Bonvin, 1998](#); [K. S. Lee y Lee, 2003](#)).

2.4.1. Punto de operación variante en el tiempo

Se refiere a la naturaleza dinámica de la operación de los procesos por lotes, durante la cual las variables pueden oscilar sobre amplios rangos de operación a lo largo del transcurso del ciclo y las transformaciones proceden desde un estado inicial a un estado final muy diferente. Es decir, los estados del sistema dinámico nunca están alrededor de un punto de equilibrio, sino evolucionan muy lejos de él. Además, las características importantes del proceso como la ganancia estática, las constantes de tiempo y los retardos de tiempo están cambiando con el tiempo, al igual que algunos parámetros del modelo. Por consiguiente, no existe un único punto de operación alrededor del cual el sistema de control pueda ser diseñado como en el caso de los procesos continuos.

Por ejemplo, aunque la temperatura de un reactor por lotes permanezca constante, las concentraciones y la velocidad de reacción cambian significativamente durante el lote. Debido a esto, el punto de operación variante en el tiempo trae las siguientes consecuencias: dificultad para el manejo de no linealidades, mayores requerimientos del elemento final de control, medidas poco precisas asociadas a la falta de sensores y a la amplitud del rango de operación y perturbaciones fundamentalmente internas, es decir, perturbaciones propias del sistema dinámico.

2.4.2. Estructura dinámica variante en el tiempo

A diferencia de los procesos continuos, la dimensión de los vectores de entrada, estado y salida involucrados en una operación por lotes y en general su estructura dinámica pueden cambiar con el tiempo. Por ejemplo, en un proceso de polimerización la dinámica antes del punto gel es muy diferente a después de éste.

2.4.3. Operación restringida

En procesos reales todas las variables manipuladas están restringidas físicamente. Algunas variables de salida y estado también pueden restringirse por razones de estabilidad, seguridad o para asegurar la validez del modelo. El manejo efectivo de las restricciones es frecuentemente indispensable en la operación exitosa de un proceso industrial y para el correcto desempeño del sistema de control. Además de las restricciones físicas se tienen las restricciones de operación, las cuales son necesarias para mantener las condiciones nominales de funcionamiento. En los procesos por lotes estas restricciones de operación dominan la operación del lote, ocasionando como resultado que la operación óptima (o cerca al óptimo) sea obtenida con frecuencia por el simple guiado del proceso a lo largo de dichas restricciones.

2.4.4. Comportamiento irreversible

En los procesos por lotes las propiedades de los productos que se están procesando dependen de la historia previa del proceso, lo cual hace que sea imposible introducir correcciones. Es decir, si el proceso se sale de unos determinados límites de operación, así retorne a ellos, no se garantiza la obtención de las especificaciones del producto al final del lote. A diferencia de los procesos continuos donde una apropiada acción de control regresa el proceso al estado estacionario deseado y a la obtención de las especificaciones deseadas del producto. Esta característica de irreversibilidad de los procesos por lotes puede verse como una restricción inherente al proceso en sí mismo y que en caso de violarse no se podrá obtener el resultado deseado.

2.4.5. Perturbaciones internas

Los procesos por lotes tienen en común muchas de las perturbaciones que afectan a los procesos continuos, tales como errores de proceso (por ejemplo, un mal mezclado o la introducción del solvente incorrecto), problemas en el procesamiento (ensuciamiento de los sensores y las paredes del reactor, mezclado insuficiente, temperatura o perfiles de alimentación incorrectos, fallas en el sensor) y otras perturbaciones no medibles que entran al proceso como resultado de la variabilidad de las operaciones aguas arriba (Bonvin, 1998)

2.4.6. Dificultad para el manejo de no linealidades

Debido a que los procesos por lotes no tienen un único punto de operación y poseen amplios rangos de condiciones de operación, la identificación de los parámetros del modelo se hace más difícil, ya que dichos parámetros también varían en el tiempo. Lo anterior produce no

linealidades en el proceso cuando los parámetros se encuentran multiplicando o dividiendo a los estados del proceso en un modelo (Bonvin, 1998; K. S. Lee y Lee, 2003).

2.4.7. Mayores requerimientos para el elemento final de control

Como los procesos continuos funcionan alrededor de un punto de operación, el intervalo dentro del cual se moverán las variables a controlar será pequeño y por lo tanto, la determinación de la habilidad de rango requerida por el elemento final de control para que el proceso permanezca controlado será fácilmente fijada y elegida. Por el contrario, como los procesos por lotes no tienen un punto de ajuste definido, puede ser difícil seleccionar la habilidad de rango del elemento final de control, ya que para ciertas condiciones puede saturarse y para otras, puede resultar imprecisa. Por ejemplo, las etapas transitorias frecuentemente exigen válvulas de alta precisión para el movimiento fino de los flujos (habilidad de rango bajo) pero el amplio rango de operación del proceso puede requerir válvulas que permitan variaciones muy amplias en los flujos (habilidad de rango alto). Este problema ya tiene soluciones tecnológicas, que son costosas y en donde se emplean arreglos de varios elementos finales de control denominados *tandem*.

2.4.8. Medidas poco precisas asociadas a la falta de sensores y a la amplitud del rango de operación

Los sensores químicos precisos en línea (*on-line*) de variables tan fundamentales como la concentración son aún escasos. Aunque existen sensores espectroscópicos que en años recientes han empezado a estar comercialmente disponibles, solamente se pueden utilizar en ciertos casos o pueden ser relativamente costosos. Por otro lado, las medidas disponibles (a menudo cantidades físicas como temperatura, presión, torque, turbidez, índice de refracción o conductividad eléctrica), pueden ser de baja precisión debido al amplio rango de operación que el instrumento de medida debe cubrir en un procesos por lotes.

2.4.9. Alta flexibilidad

Debido a la flexibilidad de los arreglos de producción, estos procesos pueden absorber las fluctuaciones o cambios rápidos en la demanda de los productos. Sin embargo, esto provoca además que el controlador deba tener disponibilidad para adaptarse a cada nuevo proceso, requiriendo sintonizarse nuevamente para manejar diferentes condiciones operacionales u otro tipo de productos.

2.4.10. Cambio de los efectos de las acciones correctivas en el tiempo

Inicialmente la capacidad de influir en el proceso es mayor, pero una vez el proceso evoluciona, esta capacidad decrece con el tiempo, pues cada vez hay menos tiempo para corregir el proceso. Esto y la duración finita de un lote, limita el impacto de las acciones correctivas.

2.5. Modelizado de procesos por lotes

El modelizado es el procedimiento por el cual se representa el sistema real a través de modelos matemáticos. En la teoría de control el modelo es una herramienta básica para hacer análisis y diseño de controladores. El modelizado un tema de investigación importante tanto para procesos continuos como para procesos por lotes, lamentablemente, el modelizado de procesos por lotes es tan complejo como su control. Mientras que los procesos continuos admiten ser modelados mediante técnicas empíricas sencillas como las curvas de reacción, los procesos por lotes no permiten este tipo de aproximación debido a que no existe un punto de operación fijo alrededor del cual excitar el sistema. Por este motivo los procesos por lotes necesitan de métodos de identificación de modelos empíricos de mayor complejidad.

Algunos autores realizan identificación del equipo (Özkan, Özen, Erdogan, Hapoglu, y Albaz, 2001) haciendo pruebas tipo curva de reacción sobre el equipo, pero sin los reactivos reales, empleando en su lugar algún sustituto (por ejemplo, agua corriente) que les permita obtener un estado estacionario. Por supuesto, toda la incertidumbre generada de esta manera debe ser absorbida por el sistema de control. Los modelos empíricos lineales tipo ARMAX también presentan con frecuencia incertidumbres severas, debido a que los procesos por lotes, por su naturaleza transitoria, tienden a ser altamente no lineales. Lo más común dentro del modelado empírico de procesos por lotes es el empleo de modelos no lineales tipo NARMAX (Özkan et al., 2001), redes neuronales (Tsai y Jang, 2001), modelos borrosos (*fuzzy*) (Warnes, Glassey, y Montague, 1996), entre otros o el uso de funciones lineales a tramos (Johansen, 1997) que han demostrado una capacidad adecuada de representación de estos procesos.

Algunas de las técnicas más modernas de control propuestas en la literatura se basan en modelos semi-físicos de base fenomenológica o modelos de caja gris (Srinivasan et al., 2003), ya que dichas técnicas optan por re-calcular en línea la trayectoria nominal con base en un algoritmo de optimización para considerar en todo momento la calidad del producto final. Aunque la mayoría de estas técnicas no se han aplicado industrialmente es claro que el modelado fenomenológico será imprescindible en el futuro para efectuar un control ajustado de producto que permita mantener un alto nivel de competitividad.

3. Irreversibilidad y Controlabilidad de Estado en procesos irreversibles

Existe una escasa bibliografía dedicada al análisis formal de los sistemas de control de los procesos por lotes, mientras que abunda bibliografía dedicada a casos de aplicación. De igual forma no se ha realizado un análisis profundo de los efectos de las particularidades dinámicas de los procesos por lotes tanto en el análisis, como en la síntesis de controladores para este tipo de procesos.

En particular, poco se ha enfatizado en el carácter irreversible de los procesos por lotes y en cómo esta característica dificulta su control. Además la irreversibilidad ocasiona que un sistema no sea controlable de acuerdo con la teoría de control clásica. Es evidente que la problemática del control de los procesos por lotes se encuentra pobremente caracterizada.

En este capítulo se caracteriza la irreversibilidad de los procesos por lotes. Se evidencia el efecto de la irreversibilidad en la controlabilidad de estado de los procesos por lotes y se proponen herramientas formales de análisis basadas en la teoría de conjuntos, en particular se retoma la definición de conjunto de trayectorias controlables. Finalmente, se propone el hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}}(\Omega_0, \Omega_{t_f})$ como indicador de controlabilidad de estado y una serie de algoritmos que permiten su cálculo.

3.1. La irreversibilidad en procesos por lotes

La irreversibilidad es una característica de los procesos por lotes que se evidencia a partir del comportamiento creciente o decreciente de algunos de los estados del proceso por lotes. Así por ejemplo en los bioprocesos por lotes, el estado correspondiente a la variable biomasa y el volumen son estados crecientes. En los reactores de polimerización por lotes el peso molecular es un estado creciente. En un BSTR (tanque reactor agitado por lotes, por sus siglas en inglés) alguna concentración es creciente.

En la literatura existente se trata la irreversibilidad como una característica dinámica de los procesos por lotes (Bonvin, 1998; Russell et al., 1998) y se detallan algunos de sus efectos, sin embargo, la caracterización del efecto de irreversibilidad de los procesos por lotes en la controlabilidad y en la estabilidad de este tipo de procesos es un campo en desarrollo (C. A. Gómez, 2010; L. M. Gómez, 2009).

Para describir los procesos por lotes considerando la característica de poseer algún estado creciente o decreciente se propone el siguiente modelo matemático genérico:

$$\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \tag{3.1}$$

Donde $t \in \mathbb{R}^+$, $\mathbf{x}(t)$ es el vector de estados y $\mathbf{u}(t)$ es la acción de control. Con $\mathbf{x}(t) \in \mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$, $\mathbf{u}(t) \in \mathcal{U} \subseteq \mathbb{R}^m$, $f(\cdot, \cdot) : \mathcal{X} \times \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{X}$. Sea \mathcal{U} el conjunto de acciones de control admisibles y \mathcal{X} el conjunto de estados admisibles. Además, se asume que f es acotada y Lipschitz. Lo anterior permite asegurar que para cada $t \geq 0$, $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, $\mathbf{u} \in \mathcal{U}$, existe una única solución $\mathbf{x}(t) \rightarrow \mathcal{X}$.

Si para algún $a = 1, \dots, n$ y para todo $t \geq 0$ se cumple que $\dot{\mathbf{x}}_a \geq 0$ o $\dot{\mathbf{x}}_a \leq 0$, $\dot{\mathbf{x}}_a$ será una función creciente o decreciente para todo $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ y $\mathbf{u} \in \mathcal{U}$.

Las anteriores condiciones también se pueden extender al caso discreto, donde se tiene:

$$\mathbf{x}(i+1) = f(\mathbf{x}(i), \mathbf{u}(i)) \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X} \wedge \mathbf{u} \in \mathcal{U} \quad (3.2)$$

Si para algún $a = 1, \dots, n$ y para todo $i = 0, 1, 2, \dots$ se cumple que $\mathbf{x}_a(i+1) \geq \mathbf{x}_a(i)$ o $\mathbf{x}_a(i+1) \leq \mathbf{x}_a(i)$, $\Delta \mathbf{x}_a$ será una función creciente o decreciente para todo $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ y $\mathbf{u} \in \mathcal{U}$.

Dicho estado creciente o decreciente es la causa del carácter irreversible de los procesos por lotes. Note que un sistema con un estado creciente o decreciente no puede recuperar la condición inicial una vez comience a evolucionar ya que este estado, creciente o decreciente, siempre tendrá un valor mayor o menor, según sea el caso. Bajo ninguna circunstancia el estado permanece fijo, es decir, el estado se encuentra en permanente evolución.

3.2. Controlabilidad de estado

La controlabilidad de estado es la propiedad que permite determinar si efectivamente existe una acción de control admisible que garantice la evolución del sistema desde una condición inicial a una condición final deseada; además, de garantizar la posibilidad de retornar a la condición deseada (L. M. Gómez et al., 2008). Kalman (1959) definió la controlabilidad de estado para sistemas dinámicos lineales invariantes en el tiempo, en trabajos posteriores (Hermann y Krener, 1977; Isidori, 1995; Sontag, 1998) el concepto de controlabilidad de estado es generalizado para los sistemas dinámicos no lineales; sin embargo, en el caso no lineal el análisis de controlabilidad es más complejo y es necesario definir otros términos; tales como, alcanzabilidad y controlabilidad local y global, conceptos éstos que en el caso de los sistemas dinámicos lineales coinciden.

3.2.1. Controlabilidad de estado desde la teoría de conjuntos

Bertsekas y Rhodes (1971) usan la teoría de conjuntos para definir el conjunto alcanzable y definir por tanto, la alcanzabilidad. A diferencia del paradigma de Kalman (1959), los conceptos planteados en Bertsekas y Rhodes (1971) han sido pobremente utilizado en la teoría de control. A partir Blanchini (1999), una revisión de la teoría de conjuntos invariantes, la teoría de conjuntos comienza nuevamente a considerarse, especialmente para el diseño de Controladores Predictivos Basados en Modelos (Bravo et al., 2005; Kerrigan, 2000) y sólo recientemente es publicado el primer libro que relaciona la teoría de conjuntos con la teoría

de control (Blanchini y Miani, 2008), en este paradigma se definen una serie de conjuntos con una propiedad determinada, entre los que está el conjunto invariante positivo.

Con el fin de analizar la controlabilidad de los procesos por lotes por medio del conjunto de trayectorias controlables es necesario primero definir los conjuntos alcanzable y controlable. Considere el sistema no lineal:

$$\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \quad (3.3)$$

Donde $t \in \mathbb{R}^+$, $\mathbf{x}(t)$ es el vector de estados y $\mathbf{u}(t)$ es la acción de control. Con $\mathbf{x}(t) \in \mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$, $\mathbf{u}(t) \in \mathcal{U} \subseteq \mathbb{R}^m$, $f(\cdot, \cdot) : \mathcal{X} \times \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{X}$ y un horizonte de tiempo arbitrario $t_f \geq 0$. Sea \mathcal{U} el conjunto de acciones de control admisibles y \mathcal{X} el conjunto de estados admisibles. Además, se asume que f es acotada y Lipschitz. Lo anterior permite asegurar que para cada $t \in [0, t_f]$, $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, $\mathbf{u} \in \mathcal{U}$, existe una única solución $\mathbf{x}(\cdot) : [0, t_f] \rightarrow \mathcal{X}$. Para cada $\tau \in [0, t_f]$, la solución se denota por $\phi(0, \tau, \mathbf{x}, \mathbf{u})$.

Considere además el sistema en tiempo inverso del sistema (3.3) que se indica en (3.4)

$$\dot{\mathbf{x}} = -f(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \quad (3.4)$$

El sistema en tiempo inverso es aquel que resulta de hacer el tiempo negativo, sin embargo, para el caso de los sistemas (3.3) basta reemplazar la función f por $-f$ (Sontag, 1998). En este caso se tiene que la solución del sistema sería entonces $\phi^-(\tau, t_f, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = \mathbf{x}$ con $\mathbf{v} = \mathbf{u}(t_f - \tau)$.

Definición 1 (Conjunto alcanzable en el tiempo t desde el conjunto Ω_τ , $\mathcal{R}_t(\Omega_\tau)$). *Dado el conjunto Ω_τ , el conjunto alcanzable $\mathcal{R}_t(\Omega_\tau)$ desde Ω_τ en un tiempo $t > \tau$ es el conjunto de todos los estados \mathbf{x} , para los cuales existe $\mathbf{x}(\tau) \in \Omega_\tau$ y $\mathbf{u}(\cdot) \in \mathcal{U}$ tal que $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}$, siendo \mathcal{U} el conjunto de acciones de control admisibles para el sistema y \mathcal{X} el conjunto de estados admisibles para el sistema.*

$$\mathcal{R}_t(\Omega_\tau) = \{\mathbf{z} \in \mathcal{X} \mid \exists \mathbf{x} \in \Omega_\tau \wedge \mathbf{u} \in \mathcal{U} : \mathbf{z} = \phi(\tau, t, \mathbf{x}, \mathbf{u})\} \quad (3.5)$$

El conjunto alcanzable está conformado por todos aquellos vectores del espacio de estados admisibles que pueden ser alcanzados a partir de la evolución del sistema dinámico bajo el efecto de alguna acción de control admisible a través de una trayectoria de estados admisibles. La Figura 3.1 ilustra la definición del conjunto alcanzable.

Definición 2 (Conjunto controlable $\mathcal{C}_t(\Omega_\tau)$ hacia el conjunto Ω_τ en el tiempo t). *Dado el conjunto Ω_τ , el conjunto Controlable $\mathcal{C}_t(\Omega_\tau)$ hacia Ω_τ en un tiempo $t < \tau$ es el conjunto de todos los estados \mathbf{x} para los cuales existe un $\mathbf{u}(\cdot) \in \mathcal{U}$ tal que si $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}$ entonces $\mathbf{x}(\tau) \in \Omega_\tau$.*

$$\mathcal{C}_t(\Omega_\tau) = \{\mathbf{z} \in \mathcal{X} \mid \exists \mathbf{u} \in \mathcal{U} : \phi(t, \tau, \mathbf{z}, \mathbf{u}) \in \Omega_\tau\} \quad (3.6)$$

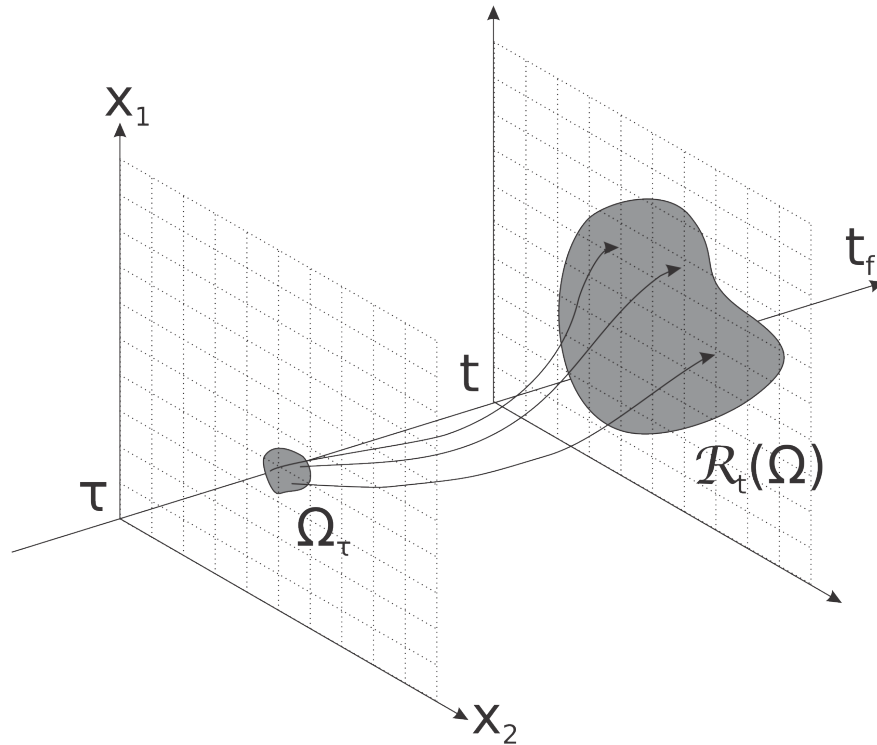


Figura 3.1.: Conjunto alcanzable en el tiempo t desde el conjunto Ω_τ , $\mathcal{R}_t(\Omega)$

El conjunto controlable está conformado por todos aquellos vectores del espacio de estados admisibles que, bajo la influencia de alguna acción de control admisible, pueden llegar en un tiempo determinado a estar dentro del del conjunto. La Figura 3.2 ilustra la definición del conjunto controlable.

3.2.2. Conjunto de trayectorias controlables

El análisis de la controlabilidad de estado de procesos irreversibles no es posible por medio del enfoque clásico, ya que para que un sistema dinámico no lineal sea controlable, el sistema debe ser reversible y satisfacer la condición de rango de los corchetes de Lie (Sontag, 1998) (Corolario 4.3.12, p.159), En L. M. Gómez et al. (2008) se utiliza el paradigma de análisis de la controlabilidad de estado desde la teoría de conjuntos, para ello se plantean la definición de *conjunto de trayectorias controlables*, que indica la severidad de la irreversibilidad de un proceso y por consiguiente, su controlabilidad.

Para definir el conjunto de trayectorias controlables se parte de las definiciones de conjunto alcanzable y conjunto controlable para formar un conjunto de conjuntos donde se cumplen ambas características. Para que un conjunto Ω_t sea simultáneamente alcanzable desde Ω_0 , el conjunto de condiciones iniciales y controlable hacia Ω_{t_f} , el conjunto de condiciones finales; éste debe ser la intersección entre $\mathcal{R}_t(\Omega_0)$ y $\mathcal{C}_t(\Omega_{t_f})$. De esta manera el conjunto de trayectorias controlables puede definir como:

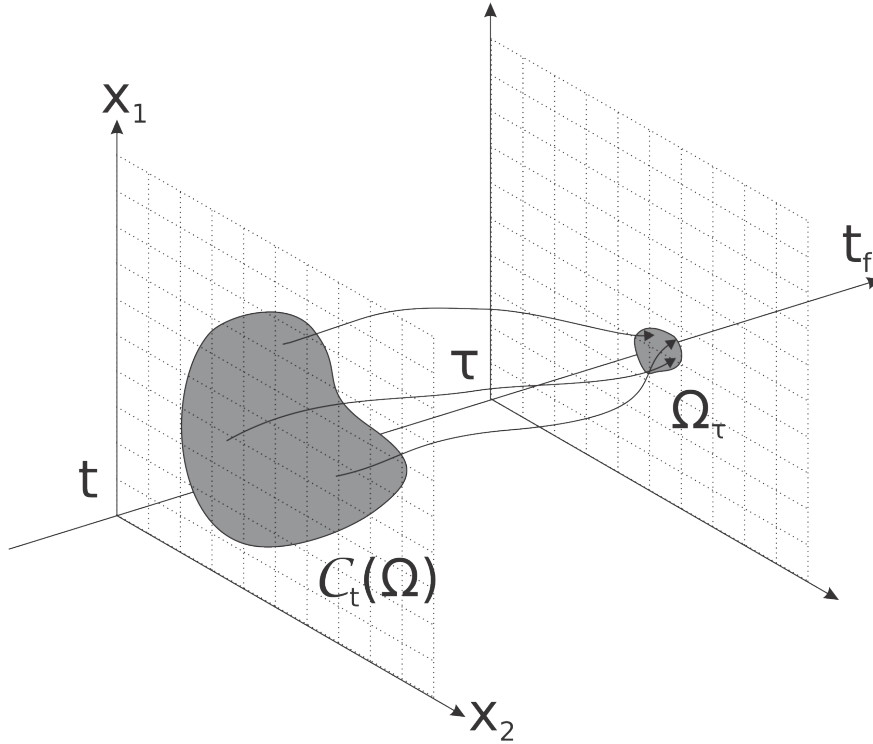


Figura 3.2.: Conjunto controlable $\mathcal{C}_t(\Omega_\tau)$ hacia Ω_τ en el tiempo t

Definición 3 (Conjunto de trayectorias controlables desde Ω_0 a Ω_{t_f} , $\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})$) (C. A. Gómez, 2010; L. M. Gómez, 2009)). *Secuencia de los conjuntos \mathcal{T}_t de estados alcanzables en un tiempo t desde Ω_0 , el conjunto de condiciones iniciales, y controlables en un tiempo $t_f - t$ hacia Ω_{t_f} , el conjunto de condiciones finales; para los cuales existe una secuencia de acciones de control admisibles, tales que para toda condición inicial $\mathbf{x}(0) \in \Omega_0$ es posible garantizar que el sistema puede alcanzar una condición final $\mathbf{x}(t_f) \in \Omega_{t_f}$ a través de una trayectoria de estados $\mathbf{x}(\cdot) \in \mathcal{X}$. Con $\mathcal{T}_t(\Omega_0, \Omega_{t_f}) = \mathcal{R}_t(\Omega_0) \cap \mathcal{C}_t(\Omega_{t_f})$*

$$\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f}) = \{\mathbf{x} \in \mathcal{X} | \mathbf{x} \in \mathcal{R}_t(\Omega_0) \wedge \mathbf{x} \in \mathcal{C}_t(\Omega_{t_f})\} \forall t \in [0, t_f] \quad (3.7)$$

La Figura 3.3 ilustra la definición del conjunto de trayectorias controlables.

3.3. Indicadores de controlabilidad de estado para procesos por lotes

El análisis clásico de la controlabilidad de estado y de otras definiciones de controlabilidad permite determinar si un proceso es controlable o no, en otras palabras, la controlabilidad se determina como un valor binario que puede ser verdadero o falso. Este enfoque no aporta suficiente información para el análisis de procesos por lotes ya que debido a su carácter

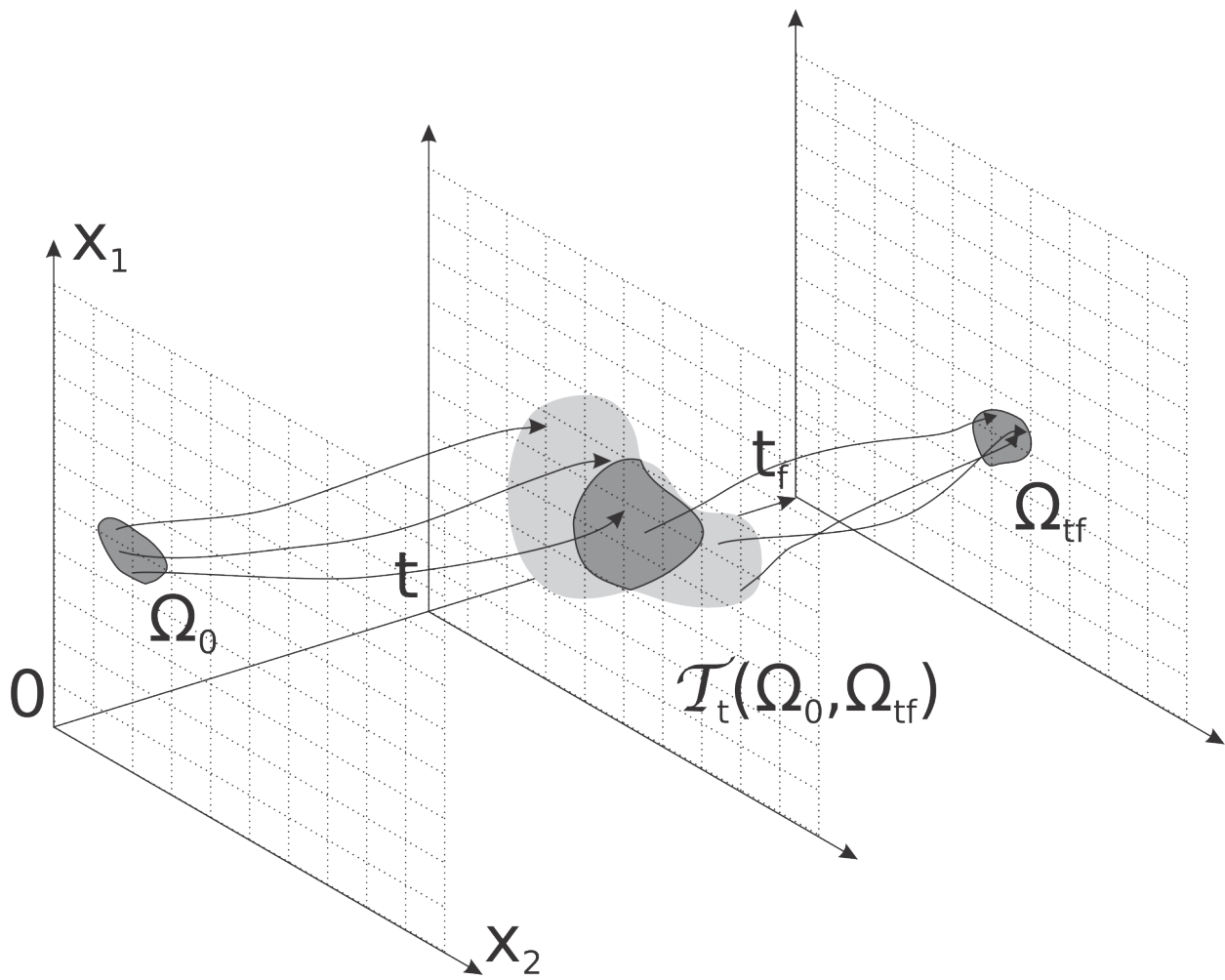


Figura 3.3.: Conjunto de trayectorias controlables desde Ω_0 a Ω_{t_f} , $\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})$

irreversible siempre serían no controlables. Para el análisis de procesos por lotes es necesario usar *indicadores* de controlabilidad que permitan comparar diversas configuraciones de un proceso y medir que tan controlable es una configuración.

En la literatura existe una gran variedad de indicadores de controlabilidad para procesos continuos que buscan cuantificar la relación entre el rendimiento, el comportamiento dinámico y el conjunto de todos los posibles puntos de operación de la planta con los parámetros de diseño del proceso y el controlador. Algunos de estos indicadores son: Índice de Niederlinski (Dimian y Bildea, 2004), Arreglo de Ganancias Relativas (*Relative Gain Array, RGA*) (Alhammadi, 2004; Dimian y Bildea, 2004), RGA dinámico (Mc Avoy, Arkun, Chen, Robinson, y Schnelle, 2003), RGA efectivo (Xiong, Cai, y He, 2005), Integral del Error Cuadrático (*Integral Square Error, ISE*) (Flores-Tlacuahuac y Biegler, 2007; Sendin, Moles, Alonso, y Banga, 2004), Índice de Resistencia a la Perturbación (*Disturbance Resistance Index, DRI*) (Karafyllis y Kokossis, 2002), Número de Rendimiento Robusto (*Robust Performance Number, RPN*) (Engell, Trierweiler, Völker, y Pegel, 2004), Enfoque *back-off* (Kookos y Perkins, 2004) y Volumen de tanque de compensación equivalente (Zheng y Mahajanam, 1999).

Para los procesos por lotes Srinivasan y Bonvin (2007) proponen un teorema para determinar la controlabilidad de procesos por lotes por medio del rango de la matriz del sistema linealizado localmente y el Grammiano de las matrices de transferencia entrada-salida. Sin embargo este indicador esta definido para controlabilidad entrada-salida y en consecuencia, solo puede ser usado para evaluar la controlabilidad lote-a-lote para procesos por lotes repetitivos. Es importante agregar que este indicador es de carácter binario, es decir, solo informa si el proceso *es* o *no es* controlable, por lo que no puede ser usado como criterio de optimalidad.

Para que un indicador de controlabilidad de estado pueda ser usado como criterio de controlabilidad óptima debe tener en cuenta la dinámica del proceso y las restricciones de los estados y las variables manipuladas. En el caso de los procesos por lotes, también debe reflejar el efecto de sus dos propiedades características: el tiempo final de lote y el efecto de las condiciones iniciales. A continuación se plantea un indicador de controlabilidad formulado para cumplir con las características anteriormente mencionadas:

El hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ es el volumen dentro del cual se encuentran todas las trayectorias controlables para un sistema, es decir, cualquier vector de estados $\mathbf{x} \in \eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ será alcanzable desde Ω_0 y controlable hacia Ω_{t_f} . La dimensión de este hipervolumen es $n + 1$ pues comprende la dimensión del espacio de estados admisibles y al abarcar el tiempo $[0, t_f]$ aumenta una dimension. El hipervolumen de controlabilidad es una cantidad dimensional con las unidades $\mathcal{X} * tiempo$.

Definición 4 (Hipervolumen de controlabilidad desde Ω_0 a Ω_{t_f} , $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$). *Hipervolumen en \mathbb{R}^{n+1} ocupado por todos los estados alcanzables desde Ω_0 , el conjunto de condiciones iniciales, y controlables hacia Ω_{t_f} , el conjunto de condiciones finales; para los cuales existe una secuencia de acciones de control $\mathbf{u}(\cdot) \in \mathcal{U}$, tales que para toda condición inicial $\mathbf{x}(0) \in \Omega_0$ es posible garantizar que el sistema puede alcanzar una condición final $\mathbf{x}(t_f) \in \Omega_{t_f}$ a través de una trayectoria de estados $\mathbf{x}(\cdot) \in \mathcal{X}$.*

El volumen de controlabilidad es entonces la integral en el tiempo del hipervolumen del t -ésimo subconjunto ($\mathcal{T}_t(\Omega_0, \Omega_{t_f})$) del conjunto de trayectorias controlables.

$$\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})} = \int_0^{t_f} \int_{\mathcal{T}_t(\Omega_0, \Omega_{t_f})} 1 d\mathbf{x} dt \quad (3.8)$$

3.4. Cálculo del hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$

El cálculo del hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ por métodos numéricos requiere de la discretización de la integral temporal y la de estado. Una vez discretizadas las integrales se debe calcular cada uno de los subconjuntos ($\mathcal{T}_t(\Omega_0, \Omega_{t_f})$) del conjunto de trayectorias controlables lo que implica el cálculo de los conjuntos alcanzables y controlables.

3.4.1. Discretización temporal

La integral temporal puede transformarse en una integral de Riemann por la izquierda, donde k es el número de particiones, así la ecuación 3.8 se puede aproximar a:

$$\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})} \approx \sum_{i=1}^k \left\{ \int_{\mathcal{T}_{i-1}(\Omega_0, \Omega_{t_f})} 1 d\mathbf{x} \right\} (t_{i-1} - t_i) \quad (3.9)$$

Para una partición de tamaño constante $t_{i-1} - t_i = \frac{t_f}{k}$, así la ecuación 3.9 se simplifica a:

$$\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})} \approx \sum_{i=1}^k \left\{ \int_{\mathcal{T}_{i-1}(\Omega_0, \Omega_{t_f})} 1 d\mathbf{x} \right\} \frac{t_f}{k} \quad (3.10)$$

3.4.2. Cálculo de los conjuntos Alcanzable ($\mathcal{R}(\Omega_0)$) y Controlable ($\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$)

El cálculo del volumen de $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ a partir de la ecuación 3.10 implica el cálculo de los $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$ para cada $i \in [0, k]$ y debido a la ecuación 3.7 el cálculo de cada $\mathcal{R}_i(\Omega_0)$ y $\mathcal{C}_i(\Omega_{t_f})$. El cálculo de los conjuntos alcanzables y controlables para sistemas lineales ha sido tratado por múltiples autores. [Blanchini y Miani \(2008\)](#) presentan algunas formas de calcularlos a partir de operaciones con conjuntos en forma de elipses y de poliedros. [Kerrigan \(2000\)](#) establece algunas herramientas matemáticas para evaluarlos a través de aproximaciones politópicas. Para el caso de sistemas no lineales, [Bravo et al. \(2005\)](#) proponen el cálculo de conjuntos controlables para sistemas no lineales utilizando métodos de aritmética intervalar.

En diversas aplicaciones de la teoría de control, donde los problemas son intratables o muy complejos computacionalmente, las técnicas de algoritmos aleatorizados han mostrado ser

una buena alternativa (Vidyasagar, 1998), especialmente en aquellos problemas donde la complejidad aumenta exponencialmente con el orden del sistema.

Un algoritmo aleatorizado es aquel que durante su ejecución realiza elecciones aleatorias para solucionar un problema. En L. M. Gómez (2009), se propone un algoritmo aleatorizado para hallar los conjuntos alcanzables y controlables a través de métodos tipo Monte Carlo y se formaliza su uso al establecer las condiciones en las cuales se tiene un menor riesgo de encontrar una solución errónea.

Algoritmo 1 (Cálculo del conjunto alcanzable en t desde Ω_0). *Para un sistema dinámico no-lineal 3.3, un conjunto de condiciones iniciales Ω_0 , un error ε y una probabilidad de fallo δ :*

- *Inicio*
- *Determinar s , el tamaño de la muestra, dado un error ε y una probabilidad de fallo δ por medio de la cota de Chernoff:*

$$s \leq \frac{1}{2\varepsilon^2} \log \frac{2}{\delta} \quad (3.11)$$

- *Generar s muestras aleatorias $\mathbf{u}_j \in \mathcal{U}$ con $j = 1, 2, \dots, s$*
- *Calcular los $\mathbf{r}_j = \phi(0, t, \mathbf{x}, \mathbf{u})$*
- *Descartar aquellos $\mathbf{r}_j \notin \mathcal{X}$ como no válidos.*
- *Fin: La nube de puntos formada por los \mathbf{r}_j válidos es una representación de $\mathcal{R}_t(\Omega_0)$ con un error ε y una probabilidad de fallo δ*

Algoritmo 2 (Cálculo del conjunto controlable en t hacia Ω_{t_f}). *Para un sistema dinámico no-lineal 3.3, un conjunto de condiciones finales Ω_{t_f} , un error ε y una probabilidad de fallo δ :*

- *Inicio*
- *Determine s , el tamaño de la muestra, dado un error ε y una probabilidad de fallo δ por medio de la cota de Chernoff (3.11)*
- *Generar s muestras aleatorias $\mathbf{v}_j \in \mathcal{U}$ con $j = 1, 2, \dots, s$*
- *Calcular los $\mathbf{c}_j = \phi^-(t, t_f, \mathbf{x}, \mathbf{v})$*
- *Descartar aquellos $\mathbf{c}_j \notin \mathcal{X}$ como no válidos.*
- *Fin: La nube de puntos formada por los \mathbf{c}_j válidos es una representación de $\mathcal{C}_t(\Omega_{t_f})$ con un error ε y una probabilidad de fallo δ*

3.4.3. Discretización del espacio de estados admisibles, \mathcal{X}

Los métodos aleatorios producen representaciones del conjunto alcanzable, $\mathcal{R}(\Omega_0)$ y el conjunto controlable, $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$; compuestas por una gran cantidad de puntos en el espacio de estados. Para determinar el hipervolumen de estos conjuntos se han utilizado métodos de Envolventes Convexas (C. A. Gómez, 2010), sin embargo, estos métodos asumen la convexidad del conjunto. Para sistemas no lineales no se puede garantizar la convexidad o la conexidad de $\mathcal{R}(\Omega_0)$ o $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$ y si alguno de estos conjuntos es no convexo, el conjunto de trayectorias controlables $\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})$ podrá no ser convexo también. Por lo tanto se hace necesario usar métodos que no sean sensibles a la convexidad o conexidad del conjunto.

El hipervolumen se puede calcular por medio de la partición del espacio de estados admisibles \mathcal{X} . El particionado de un espacio es el proceso de dividir un espacio (normalmente un Espacio euclídeo) en dos o más conjuntos disjuntos. En otras palabras, particionar un espacio lo divide en regiones no superpuestas. Cualquier punto en el espacio se encuentra en una, y sólo una, de las regiones. Si bien estas particiones pueden ser de cualquier tamaño, es conveniente particionar \mathcal{X} en c particiones $\mathcal{B}_{\mathbf{b}}$ en cada eje, donde \mathbf{b} es un índice vectorial de dimensión n que indica la posición de una partición de \mathcal{X} . De esta manera se crearán c^n particiones de \mathcal{X} .

En cada una de estas regiones se aplica la función de pertenencia del conjunto cuyo volumen se desea calcular. Esta función se define como:

Definición 5 (Función de pertenencia del conjunto Ω , en \mathbf{x} , $I_{\Omega}(\mathbf{x})$). *La función de pertenencia del conjunto Ω en \mathbf{x} , $I_{\Omega}(\mathbf{x})$, tiene un valor de 1 si $\mathbf{x} \in \Omega$. La función de pertenencia tiene un valor de 0 para cualquier otro caso.*

$$I_{\Omega}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in \Omega \\ 0 & \end{cases} \quad (3.12)$$

La función de pertenencia continua $I_{\Omega}(\mathbf{x})$ se puede re-definir para un \mathcal{X} discretizado de la siguiente manera:

Definición 6 (Función de pertenencia del conjunto Ω en la partición \mathbf{b} , $I_{\Omega}(\mathbf{b})$). *La función de pertenencia del conjunto Ω en la partición \mathbf{b} , $I_{\Omega}(\mathbf{b})$, tiene un valor de 1 si existe por lo menos un $\mathbf{x} \in \mathcal{B}_{\mathbf{b}}$ tal que $\mathbf{x} \in \Omega$. Donde \mathbf{b} es un índice vectorial de dimensión n que indica la posición de una partición de \mathcal{X} , con $\mathbf{b}_a = 1, 2, \dots, b$ y $a = 1, 2, \dots, n$. La función de pertenencia tiene un valor de 0 para cualquier otro caso.*

$$I_{\Omega}(\mathbf{b}) = \begin{cases} 1 & \exists \mathbf{x} \in \mathcal{B}_{\mathbf{b}} : \mathbf{x} \in \Omega \\ 0 & \end{cases} \quad (3.13)$$

En la Figura 3.4 se presenta un ejemplo de la evaluación de la función de pertenencia de un conjunto en cada una de las particiones $\mathcal{B}_{\mathbf{b}}$ de un espacio de estados admisibles discretizado.

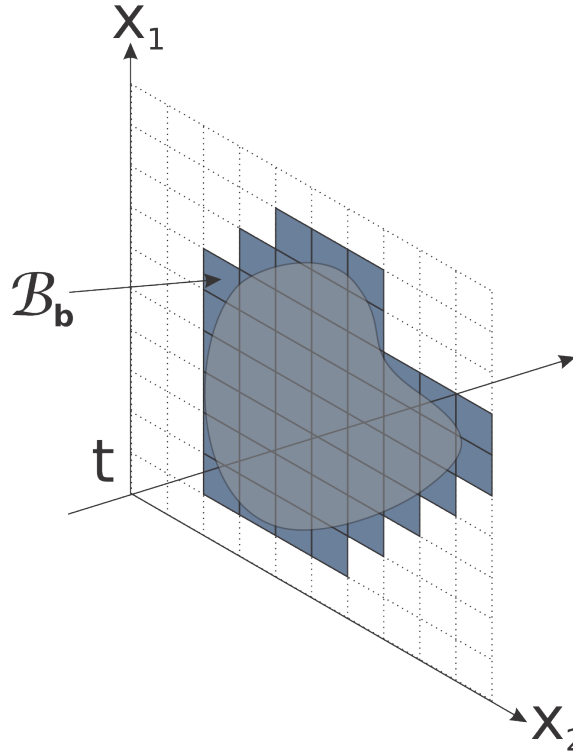


Figura 3.4.: Discretización del espacio de estados admisibles \mathcal{X} y evaluación de la función de pertenencia $I_{\Omega}(\mathbf{b})$

3.4.4. Cálculo del conjunto de trayectorias controlables en i , $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$

Para calcular $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$ es necesario calcular la intersección de $\mathcal{C}_i(\Omega_{t_f})$ y $\mathcal{R}_i(\Omega_0)$. En un \mathcal{X} discretizado esto implica calcular la función de pertenencia de $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$ en cada una de las particiones. Combinando las ecuaciones 3.7 y 3.13 la función de pertenencia de $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$ en \mathbf{b} , $I_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}(\mathbf{b})$ se puede expresar como:

$$\begin{aligned} I_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}(\mathbf{b}) &= \begin{cases} 1 & \exists \mathbf{x} \in \mathcal{B}_{\mathbf{b}} : \mathbf{x} \in \mathcal{C}_i(\Omega_{t_f}) \wedge \mathbf{x} \in \mathcal{R}_i(\Omega_0) \\ 0 & \end{cases} \\ &= I_{\mathcal{R}_i(\Omega_0)}(\mathbf{b}) I_{\mathcal{C}_i(\Omega_{t_f})}(\mathbf{b}) \end{aligned} \quad (3.14)$$

La función de pertenencia de $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$ permite construir una representación discreta y binaria del conjunto al evaluar $I_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}(\mathbf{b})$ para todo $\mathbf{b} \in \mathcal{X}$.

3.4.5. Cálculo del hipervolumen de $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$, $\eta_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$

El hipervolumen de cada $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$ se puede calcular por medio de la discretización del espacio de estados admisibles \mathcal{X} y la función de pertenencia de $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$, $I_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$. Para

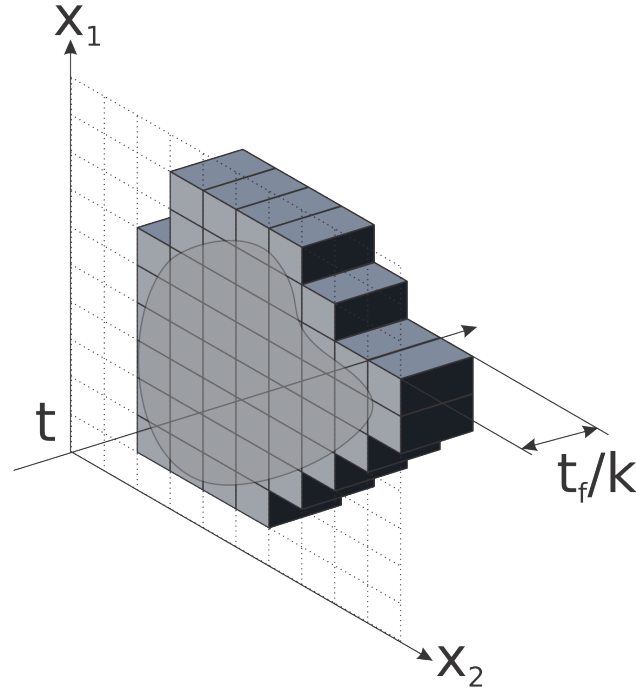


Figura 3.5.: Hipervolumen de $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$, $\eta_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$

usar la función de pertenencia de $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$ (Ecuación 3.12) es necesario redefinir la ecuación 3.10 como la integral sobre \mathcal{X} de $I(\mathbf{x})$:

$$\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})} \approx \sum_{i=0}^{k-1} \left\{ \int_{\mathcal{X}} I_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right\} \frac{t_f}{k} \quad (3.15)$$

El término interior de la ecuación 3.15 es el hipervolumen de $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$, $\eta_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$. Este hipervolumen se puede aproximar por medio de la suma de la función de pertenencia de $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$, $I_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ sobre el espacio discretizado, esto es equivalente a contar el número de particiones que pertenecen a $\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})$. Al multiplicar este número de particiones por el hipervolumen de cada partición, $\eta_{\mathcal{B}_b}$ la cantidad obtenida será una aproximación a $\eta_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$. Esta aproximación se ilustra en la figura 3.5.

$$\begin{aligned} \eta_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})} &\approx \sum_{\mathbf{b}_1=1}^b \cdots \sum_{\mathbf{b}_n=1}^b \left\{ I_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}(\mathbf{b}) \right\} \eta_{\mathcal{B}_b} \\ \eta_{\mathcal{B}_b} &= \prod_{a=1}^n \left\{ \frac{\max(\mathbf{x}_a) - \min(\mathbf{x}_a)}{c} \right\} \end{aligned} \quad (3.16)$$

3.4.6. Cálculo de una aproximación discreta del hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$

Una vez definidas la discretización temporal y espacial, se pueden combinar las ecuaciones 3.15 y 3.16:

$$\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})} \approx \sum_{i=0}^{k-1} \left\{ \sum_{\mathbf{b}_1=1}^b \cdots \sum_{\mathbf{b}_n=1}^b \left\{ I_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}(\mathbf{b}) \right\} \eta_{\mathcal{B}_{\mathbf{b}}} \right\} \frac{t_f}{k} \quad (3.17)$$

La precisión de esta aproximación dependerá del valor de k y c . Ya que los conjuntos controlable, $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$ y alcanzable, $\mathcal{R}(\Omega_0)$ tienen un error ε en su aproximación aleatorizada dada por la cota de Chernoff (Ecuación 3.11), no tiene sentido calcular una aproximación discreta con un error menor. De esta manera los valores máximos de la partición temporal y espacial se pueden fijar en $k = \frac{1}{\varepsilon} + 1$ y $c = \frac{1}{\varepsilon}$.

Los procedimientos para el cálculo de $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ pueden condensarse en un algoritmo:

Algoritmo 3 (Cálculo del hipervolumen de controlabilidad entre Ω_0 y Ω_{t_f} , $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$). *Para un sistema dinámico no-lineal 3.3, un conjunto de condiciones finales Ω_{t_f} , un conjunto de condiciones iniciales Ω_0 , un error ε y una probabilidad de fallo δ :*

- *Inicio*
- *Calcular $k = \frac{1}{\varepsilon} + 1$ y $c = \frac{1}{\varepsilon}$*
- *Calcular los k conjuntos controlables $\mathcal{C}_i(\Omega_{t_f})$ con el algoritmo 2*
- *Calcular los k conjuntos alcanzables $\mathcal{R}_i(\Omega_0)$ con el algoritmo 1*
- *Calcular los k el hipervolumenes $\eta_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ con la ecuación 3.16*
- *Sumar los k el hipervolumenes $\eta_{\mathcal{T}_i(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ y multiplicar por el tamaño de paso temporal $\frac{t_f}{k}$*
- *Fin*

4. Condiciones iniciales con controlabilidad de estado óptima en procesos por lotes

En los sistemas dinámicos irreversibles las condiciones iniciales juegan un rol preponderante en el comportamiento dinámico del proceso (Russell et al., 2000) ya que en este tipo de sistemas la evolución temporal está condicionada por las condiciones iniciales debido a la ausencia de un estado estacionario.

En este capítulo se describe la influencia de las condiciones iniciales sobre el comportamiento dinámico de los procesos por lotes y su uso como variables para optimizar la controlabilidad de estado. Finalmente se propone un algoritmo para el cálculo de condiciones iniciales con controlabilidad de estado óptima por medio del hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$.

4.1. Efecto de las condiciones iniciales sobre el comportamiento dinámico de los procesos por lotes

4.1.1. Condiciones iniciales e irreversibilidad en procesos por lotes

El efecto de las condiciones iniciales e irreversibilidad en los procesos por lotes se ilustra por medio del caso de estudio del proceso de producción de la Penicilina (Banga, Balsacanto, Moles, y Alonso, 2005) que se describe en detalle en el Apéndice A. El proceso se simuló con dos conjuntos de condiciones iniciales ligeramente diferentes para los cuatro estados del proceso: las concentraciones de biomasa, de sustrato y de penicilina, y el volumen del reactor.

En la Figura 4.1 se observa como para los tres estados irreversibles: Las concentraciones de biomasa y penicilina, y el volumen, el cambio en las condiciones iniciales perdura hasta el final del lote mientras que para la concentración de sustrato, el estado reversible, se observa que la diferencia en las condiciones iniciales del estado se desvanece en el tiempo. La máxima desviación en la concentración de sustrato se observa a las 25 horas pero rápidamente el estado vuelve a su valor original.

4.1.2. Efecto de las condiciones iniciales desde la teoría de conjuntos

En la figura 4.1 se observa claramente como un cambio en las condiciones iniciales de un proceso por lotes afectará la dinámica de éste durante toda su evolución y en consecuencia a los conjuntos definidos en el Capítulo 3.

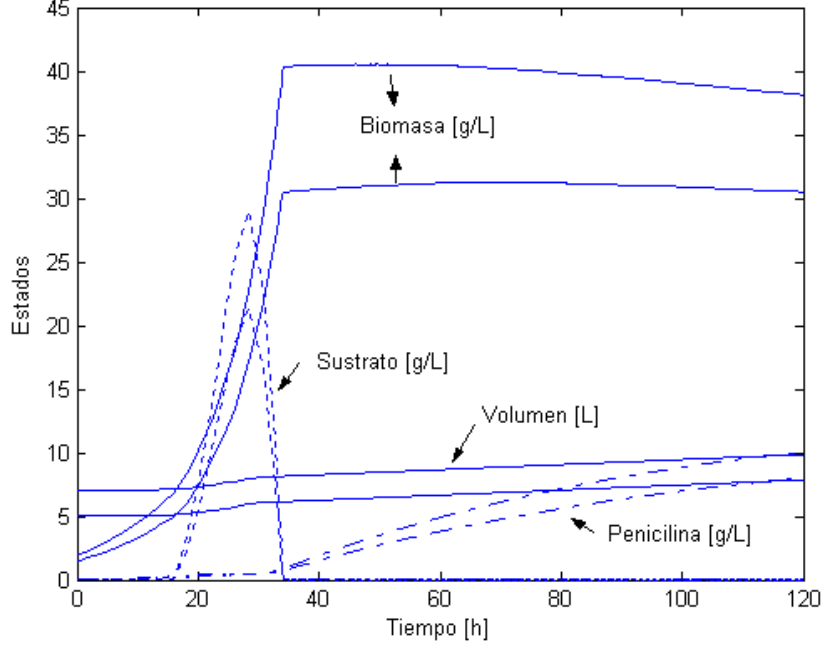


Figura 4.1.: Efecto de las condiciones iniciales en la evolución del proceso de producción de penicilina

Dado que la Definición 2 aplicada para un proceso por lotes, es decir con $\Omega_\tau = \Omega_{t_f}$, no incluye a Ω_0 se puede concluir que los cambios en las condiciones iniciales no afectarán los conjuntos controlables $\mathcal{C}_t(\Omega_{t_f})$.

Aplicando la Definición 1 para unas condiciones iniciales desde donde parten trayectorias $\mathbf{z} = \phi(0, t, \mathbf{x}, \mathbf{u})$ en las cuales los estados irreversibles se verán afectados a través de toda su evolución debido a los cambios en Ω_0 y por lo tanto, los $\mathbf{z} \in \mathcal{X}$ que conforman los conjuntos alcanzables serán diferentes para cada Ω_0 .

El efecto de los cambios en Ω_0 sobre los conjuntos alcanzables $\mathcal{R}_t(\Omega_0)$ se ilustra por medio del cálculo de los conjuntos controlables para el modelo de reactor por lotes perfectamente agitado de J. Lee y Lee (2000) que se describe en detalle en el Apéndice B. Para esta simulación los conjuntos de condiciones iniciales Ω_0 tienen un solo elemento $\mathbf{x}(0)$. Se seleccionaron dos conjuntos de condiciones iniciales Ω'_0 y Ω''_0 para los que se usaron los siguientes valores para la concentración inicial de A, \mathbf{x}_1 y la temperatura inicial \mathbf{x}_2 :

$$\begin{aligned}
 \Omega'_0 \quad \mathbf{x}_1 &= 0,9 && \left[\frac{\text{mol}}{\text{l}} \right] \\
 &\mathbf{x}_2 = 298 && [K] \\
 \Omega''_0 \quad \mathbf{x}_1 &= 2,9199 && \left[\frac{\text{mol}}{\text{l}} \right] \\
 &\mathbf{x}_2 = 302,187 && [K]
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

En la Figura 4.2 se observa que aunque el sistema tiende hacia la misma zona de \mathcal{X} , hay una diferencia clara entre los $\mathcal{R}_t(\Omega'_0)$ y los $\mathcal{R}_t(\Omega''_0)$. El cambio en $\mathcal{R}_t(\Omega_0)$ producirá, en la

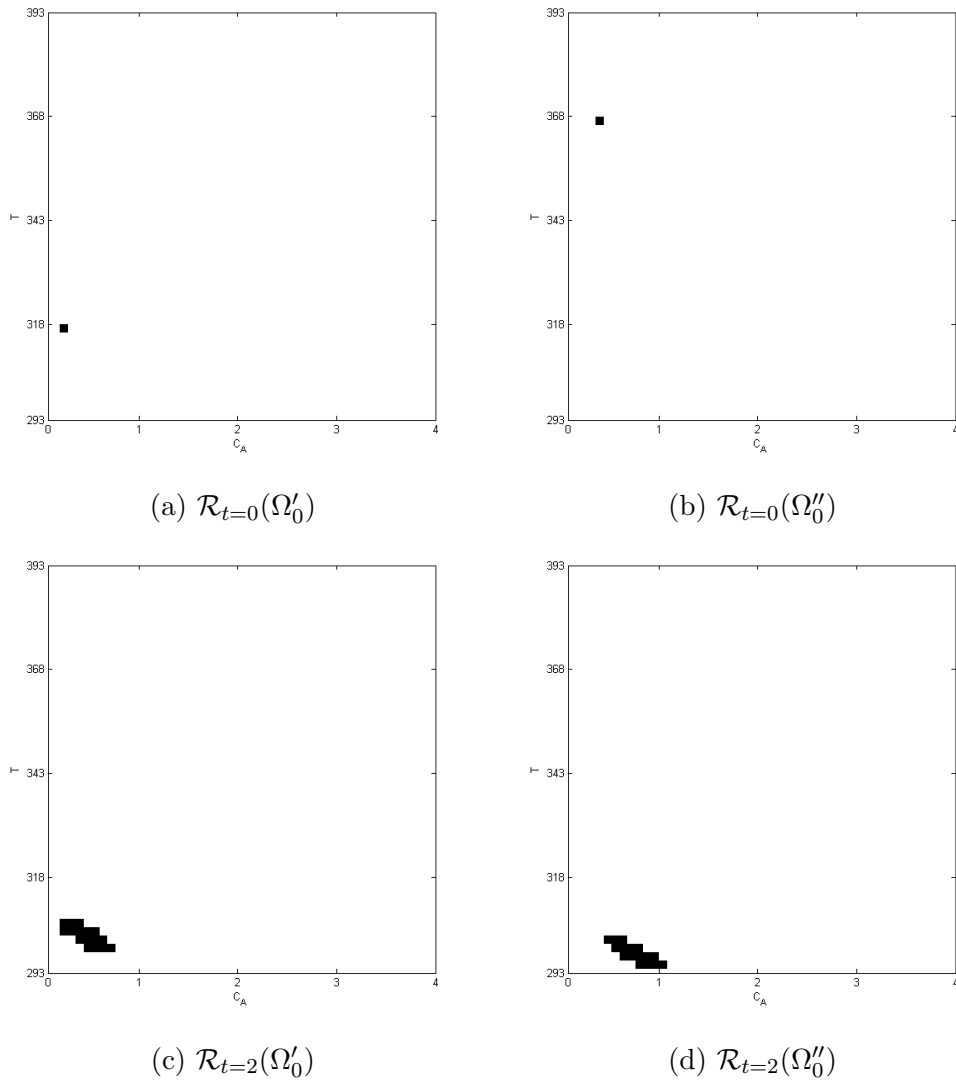


Figura 4.2.: Evolución temporal del conjunto alcanzable $\mathcal{R}_t(\Omega_0)$ para dos condiciones iniciales diferentes

mayoría de los casos, un cambio en los conjuntos de trayectorias controlables, $\mathcal{T}_t(\Omega_0, \Omega_{t_f})$ y en consecuencia, en el hipervolumen de controlabilidad, $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$. Sin embargo si $\mathcal{C}_t(\Omega_{t_f}) = \emptyset$ o $\mathcal{R}_t(\Omega_0) \subseteq \mathcal{C}_t(\Omega_{t_f})$, $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ no se verá afectado. Por este las condiciones iniciales de un proceso por lotes pueden ser consideradas como una variable relevante en el diseño de los procesos por lotes y por lo tanto, pueden ser seleccionadas por medio de una optimización que maximice la controlabilidad de estado del proceso.

4.2. Condiciones iniciales con controlabilidad de estado óptima

Debido al efecto de Ω_0 sobre $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ es posible entonces seleccionar un Ω_0^* tal que $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0^*, \Omega_{t_f})}$ sea el máximo hipervolumen de controlabilidad. Es decir que para unas condiciones iniciales Ω_0^* el sistema tendrá la mayor capacidad de alcanzar las condiciones finales Ω_{t_f} con la mayor energía disponible para rechazar perturbaciones externas. Si bien es posible explorar todo el espacio de estados admisibles \mathcal{X} en el tiempo $t = 0$, el costo computacional asociado al cálculo de $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ hace que esta opción no sea práctica.

Ω_0^* se puede seleccionar de una manera computacionalmente más eficiente por medio de un algoritmo de optimización en el que la función objetivo a maximizar sea el hipervolumen de controlabilidad evaluado entre las condiciones iniciales actuales y las condiciones finales deseadas $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0^p, \Omega_{t_f})}$ variando los parámetros que definen Ω_0^p .

A continuación se presentan los diferentes aspectos que deben ser considerados para plantear un problema de optimización de condiciones iniciales para un proceso por lotes: Restricciones a las variables de optimización, la función objetivo y el algoritmo de optimización.

4.2.1. Restricciones a las condiciones iniciales

En un problema de optimización de condiciones iniciales para un proceso por lotes la variable de optimización es el conjunto de condiciones iniciales Ω_0 . En un sentido práctico, las variables de optimización son los parámetros por medio de los cuales se define Ω_0 . Por ejemplo, si Ω_0 está compuesto por un solo $\mathbf{x}(0)$, las variables de optimización serán los $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_n$ que componen a \mathbf{x} .

Matemáticamente Ω_0 puede tomar cualquier valor $\in \mathcal{X}$, sin embargo, para propósitos prácticos no todo \mathcal{X} esta disponible. La primera consideración es que la intersección entre Ω_0 y Ω_{t_f} debe ser el conjunto vacío, pues de lo contrario existirá la posibilidad de que el equipo de proceso no realice ninguna operación. Otras posibles restricciones posibles son: máxima concentración de reactivos disponibles en el mercado, temperaturas máximas y mínimas alcanzables con los equipos aguas arriba del proceso, volumen mínimo para garantizar una agitación efectiva. Por lo tanto se puede definir el subespacio \mathcal{X}_{Ω_0} que contiene las condiciones admisibles como:

Definición 7 (Subespacio de condiciones iniciales admisibles, \mathcal{X}_{Ω_0}). *Dado un espacio de estados admisibles \mathcal{X} , un conjunto de condiciones finales Ω_{t_f} , y vectores de valores máximos y mínimos de \mathbf{x}_0 ; el subespacio de condiciones iniciales admisibles, \mathcal{X}_{Ω_0} es el conjunto de*

todos los \mathbf{x} que no pertenecen a Ω_{t_f} , son menores o iguales a $\max(\mathbf{x}_0)$ y mayores o iguales a $\min(\mathbf{x}_0)$.

$$\mathcal{X}_{\Omega_0} = \{ \mathbf{x} \in \mathcal{X} \mid \mathbf{x} \notin \Omega_{t_f} \wedge \mathbf{x} \leq \max(\mathbf{x}_0) \wedge \mathbf{x} \geq \min(\mathbf{x}_0) \} \quad (4.2)$$

4.2.2. Planteamiento de la función objetivo

Debido a que la mayoría de los algoritmos de optimización están diseñados para buscar un mínimo, es necesario formular una función objetivo $J(\Omega_0^p)$ que en su valor mínimo coincida con un máximo hipervolumen de controlabilidad. Para lograr este objetivo se usa con frecuencia el complemento multiplicativo (Ej: $1/x$), sin embargo, éste tiene un comportamiento no-lineal que no es deseable en una función objetivo. Para evitar este problema se plantean funciones basadas en el complemento aditivo, las cuales implican fijar un valor máximo para la función objetivo al cual se le restará el valor de la función que se desea maximizar.

Para un sistema 3.3, Por la Definición 3 $\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f}) \subseteq \mathcal{X}$, entonces el hipervolumen en \mathbb{R}^{n+1} del espacio de estados admisibles \mathcal{X} , $\eta_{\mathcal{X}(0,t_f)}$ será el valor máximo de $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$. El hipervolumen del espacio de estados puede calcularse como:

$$\eta_{\mathcal{X}(0,t_f)} = \int_0^{t_f} \int_{\mathcal{X}} 1 d\mathbf{x} dt \quad (4.3)$$

Para un espacio de estados admisibles restringido por desigualdades constantes en el tiempo:

$$\eta_{\mathcal{X}(0,t_f)} = \left\{ \prod_{a=1}^n \max(\mathbf{x}_a) - \min(\mathbf{x}_a) \right\} t_f \quad (4.4)$$

Fijando $\eta_{\mathcal{X}}$ como el complemento aditivo de $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$, es posible definir la función objetivo $J(\Omega_0^p)$ como:

$$J(\Omega_0^p) = \eta_{\mathcal{X}(0,t_f)} - \eta_{\mathcal{T}(\Omega_0^p, \Omega_{t_f})} \quad (4.5)$$

Por medio de esta función objetivo es posible plantear el problema de optimización de las condiciones iniciales de un proceso por lotes para obtener la máxima controlabilidad de estado de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \min_{\Omega_0^p} &= \eta_{\mathcal{X}(0,t_f)} - \eta_{\mathcal{T}(\Omega_0^p, \Omega_{t_f})} \\ \text{s.a.} & \quad \Omega_0^p \in \mathcal{X}_{\Omega_0} \end{aligned} \quad (4.6)$$

4.2.3. Selección de un algoritmo de optimización

Los algoritmos de optimización son métodos matemáticos y computacionales por medio de los cuales se busca un valor mínimo o máximo de una función objetivo $J(\Omega_0^p)$ a través la manipulación de una o más variables de búsqueda, en este caso los parámetros que definen Ω_0^p .

Los métodos de optimización más usados son los llamados métodos de gradiente. En estos métodos la dirección de búsqueda se determina por medio del cálculo del gradiente de la función objetivo en el valor de búsqueda. El gradiente indica la dirección de máximo crecimiento de la función objetivo y por lo tanto, su inverso la de máximo descenso, que se toma como dirección de búsqueda. El cálculo del gradiente requiere que la función objetivo sea continua y diferenciable. Sin embargo, si se calcula $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ por medio del Algoritmo 3 este tomará valores discretos, múltiplos de $\eta_{\mathcal{B}_b} \frac{t_f}{k}$, y por lo tanto la función objetivo $J(\Omega_0^p)$ definida según la Ecuación 4.5 será discontinua y no diferenciable.

Debido a las características de la función $J(\Omega_0^p)$ es necesario considerar algoritmos de optimización que no sean sensibles a la discontinuidad o la no-diferenciabilidad. Los algoritmos tipo Monte Carlo y los algoritmos genéticos pueden optimizar funciones objetivo como $J(\Omega_0^p)$, sin embargo estos algoritmos requieren de una gran cantidad de evaluaciones de la función objetivo, que debido al cálculo de $\mathcal{R}(\Omega_0)$ y $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$, tiene un alto costo computacional.

Una alternativa son los algoritmos de Quimiotactismo Bacteriano, propuestos inicialmente por (Bremermann, 1974). Estos algoritmos usan la técnica de desplazamiento en una dirección de búsqueda, usada también por los métodos de gradiente, pero la dirección de búsqueda se determina por medio de un método aleatorizado insensible a la discontinuidad y la no-diferenciabilidad. En este trabajo se usará el algoritmo de Quimiotactismo Bacteriano propuesto por (García y Álvarez, 2009) que se describe en detalle en el Apéndice C.

4.3. Cálculo de las condiciones iniciales con controlabilidad de estado óptima

El proceso de cálculo de las condiciones iniciales con controlabilidad óptima para un proceso por lotes, usando un algoritmo de optimización insensible la discontinuidad y la no-diferenciabilidad, puede condensarse en el siguiente algoritmo:

Algoritmo 4 (Cálculo de las condiciones iniciales con controlabilidad de estado óptima, Ω_0^*). *Para un sistema dinámico no-lineal 3.3, un conjunto de condiciones finales Ω_{t_f} , un conjunto de condiciones iniciales Ω_0 , un subespacio de condiciones iniciales admisibles \mathcal{X}_{Ω_0} , un error ε y una probabilidad de fallo δ :*

- Inicio
- Calcular $k = \frac{1}{\varepsilon} + 1$ y $b = \frac{1}{\varepsilon}$
- Calcular $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ con el Algoritmo 3
- Calcular el valor de la función objetivo $J(\Omega_0)$ con la ecuación 4.5

- Asignar Ω_0 a Ω_0^p
- Inicio del algoritmo de optimización
 1. Determinar un Ω_0^{p+1} a partir Ω_0^p . La forma en que se realiza este paso dependerá del algoritmo de optimización seleccionado.
 2. Cálculo de la función objetivo $J(\Omega_0^{p+1})$
 - Calcular los k conjuntos alcanzables $\mathcal{R}_i(\Omega_0^{p+1})$ con el Algoritmo 1
 - Calcular $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0^{p+1}, \Omega_{t_f})}$ con la ecuación 3.17
 - Calcular el valor de la función objetivo $J(\Omega_0^{p+1})$ con la ecuación 4.5
 3. Si se no se cumple la condición de parada del algoritmo se se vuelve al paso 1. De lo contrario se asigna Ω_0^{p+1} a Ω_0^*
- Fin

Durante el procedimiento de optimización no se calcula el conjunto controlable $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$ ya que las variaciones de Ω_0^p no cambian a $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$. Por lo tanto, el costo computacional asociado al cálculo del conjunto puede ahorrarse al no re-calcularlo en cada iteración del algoritmo de optimización.

5. Ejemplo Ilustrativo: El reactor por lotes de J. Lee y Lee (2000)

Para ilustrar las definiciones y algoritmos propuestos en los capítulos 3 y 4 se calcularon las condiciones iniciales con controlabilidad de estado óptima, Ω_0^* , para el modelo de un reactor por lotes perfectamente agitado propuesto por J. Lee y Lee (2000), sujeto a las condiciones adicionales propuestas por C. A. Gómez (2010). Este modelo puede ser considerado como un *benchmark* ya que representa un proceso común en la industria de manera genérica y además, posee características importantes como la no-linealidad y la irreversibilidad de ambos estados. Este modelo se describe en detalle en el Apéndice B.

5.1. Restricciones y parámetros del sistema

El modelo de un reactor por lotes de J. Lee y Lee (2000) tiene dos estados $\mathbf{x}(t)$ lo que implica que el espacio de estados admisibles \mathcal{X} será un subconjunto de \mathbb{R}^2 . Los estados del sistema son la concentración del compuesto A y la temperatura del reactor.

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &= C_A \quad \left[\frac{mol}{l} \right] \\ \mathbf{x}_2 &= T \quad [K] \end{aligned} \tag{5.1}$$

Por lo tanto el hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ y el hipervolumen del espacio de estados admisibles $\eta_{\mathcal{X}[0, t_f]}$ serán subconjuntos de $\mathbb{R}^3 \left[\frac{molK}{l} min \right]$.

El modelo tiene una acción de control $\mathbf{u}(t)$ lo que implica que el espacio de acciones de control admisibles será un subconjunto de \mathbb{R}^1 . La acción de control es la temperatura de la chaqueta de regulación de temperatura del reactor.

$$\mathbf{u}_1 = T_j \quad [K] \tag{5.2}$$

Dado que el cálculo del hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ requiere de restricciones en los estados, se establecen las siguientes:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &\geq 0 && \left[\frac{\text{mol}}{\text{l}}\right] \\ \mathbf{x}_1 &\leq 4 && \left[\frac{\text{mol}}{\text{l}}\right] \\ \mathbf{x}_2 &\geq 293 && [K] \\ \mathbf{x}_2 &\leq 393 && [K] \end{aligned} \quad (5.3)$$

Las condiciones finales se definen como todos los $\mathbf{x}(t_f) \in \mathcal{X}$ tales que:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1(t_f) &> 0,1 && \left[\frac{\text{mol}}{\text{l}}\right] \\ \mathbf{x}_1(t_f) &< 0,5 && \left[\frac{\text{mol}}{\text{l}}\right] \\ \mathbf{x}_2(t_f) &> 293 && [K] \\ \mathbf{x}_2(t_f) &< 330 && [K] \end{aligned} \quad (5.4)$$

Para simplificar la aplicación de algoritmos de optimización al cálculo de Ω_0^* , se definen los Ω_0 como conjuntos compuestos por un solo estado $\mathbf{x}(0)$. Las condiciones iniciales semilla para la optimización son las usadas por C. A. Gómez (2010):

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1(0) &= 0,9 && \left[\frac{\text{mol}}{\text{l}}\right] \\ \mathbf{x}_2(0) &= 298 && [K] \end{aligned} \quad (5.5)$$

El subespacio de condiciones iniciales admisibles \mathcal{X}_{Ω_0} es acotado por las siguientes restricciones:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1(0) &\geq 0,5 && \left[\frac{\text{mol}}{\text{l}}\right] \\ \mathbf{x}_1(0) &\leq 4 && \left[\frac{\text{mol}}{\text{l}}\right] \\ \mathbf{x}_2(0) &\geq 293 && [K] \\ \mathbf{x}_2(0) &\leq 313 && [K] \end{aligned} \quad (5.6)$$

Finalmente, se utilizó un tiempo final de lote $t_f = 4[\text{min}]$, que fue calculado por C. A. Gómez (2010) por medio de un procedimiento de optimización.

5.2. Cálculo de las condiciones iniciales con controlabilidad de estado óptima, Ω_0^*

El cálculo de Ω_0^* se ilustra a través de los pasos descritos en el Algoritmo 4.

5.2.1. Determinación de la cota de Chernoff s , el número de particiones k y b , y el hipervolumen del espacio de estados admisibles $\eta_{\mathcal{X}[0,t_f]}$

Para el cálculo de los conjuntos alcanzables $\mathcal{R}(\Omega_0)$ y controlables $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$ se seleccionó un error $\varepsilon = 0,02$ y una probabilidad de fallo $\delta = 0,02$. Por medio de la ecuación 3.11 se calcula un número de muestras $s = 5756$, sin embargo, la naturaleza aleatoria de las $u(\cdot)$ generadas causa que muchas de las trayectorias de estado $\mathbf{x}(\cdot)$ calculadas tengan valores por fuera de \mathcal{X} .

Para garantizar que se simularon *por lo menos* 5756 trayectorias de estado, el número de muestras se fijó en $s = 26461$, la cota de Chernoff calculada para un error $\varepsilon = 0,01$ y un $\delta = 0,01$, sin embargo el error y la probabilidad de fallo efectivos siguen siendo $\varepsilon = 0,02$ y $\delta = 0,02$. El número de particiones temporales es $k = \frac{1}{\varepsilon} + 1 = 51$ y el de particiones del espacio de estados admisibles $b = \frac{1}{\varepsilon} = 50$.

El hipervolumen del espacio de estados admisibles $\eta_{\mathcal{X}[0,t_f]}$ se calculó por medio de la ecuación 4.4:

$$\eta_{\mathcal{X}[0,t_f]} = 1600 \left[\frac{\text{molK}}{l} \text{min} \right] \quad (5.7)$$

5.2.2. Cálculo de los conjuntos controlables $\mathcal{C}_i(\Omega_{t_f})$

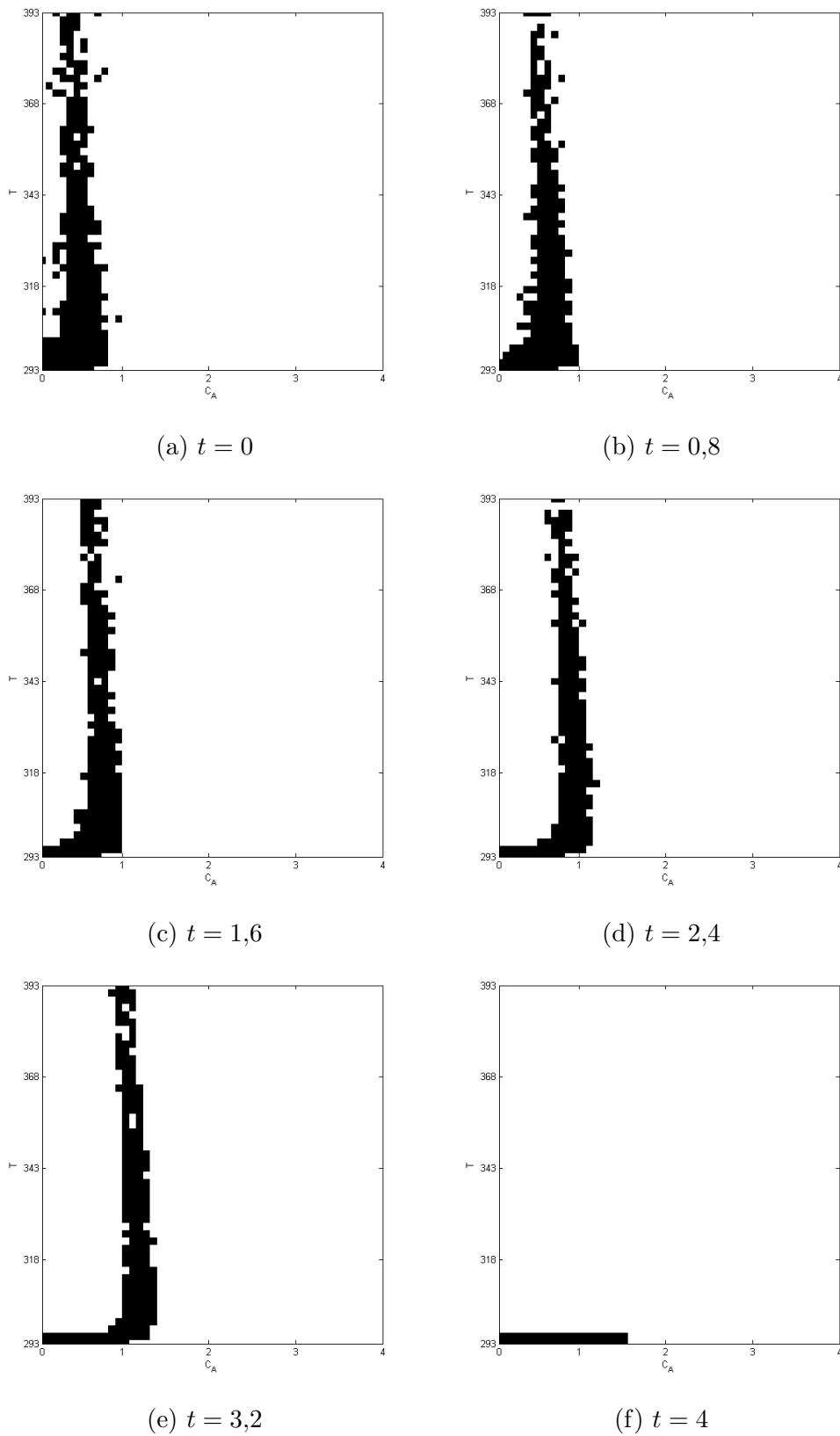
Por medio del algoritmo 2, se calcularon los k conjuntos controlables $\mathcal{C}_i(\Omega_{t_f})$. En la figura 5.1 se presentan algunos conjuntos controlables en tiempos representativos.

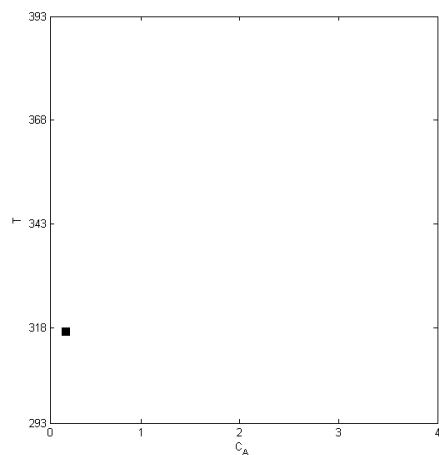
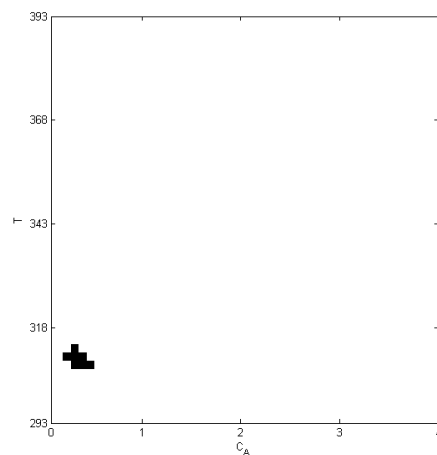
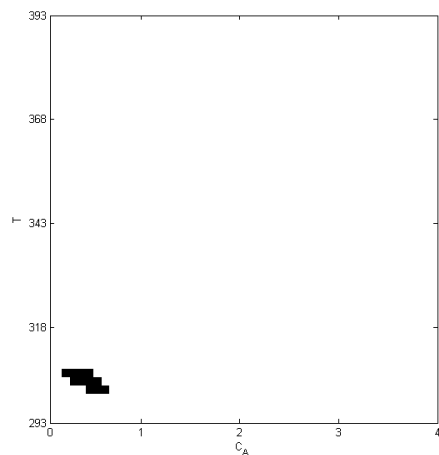
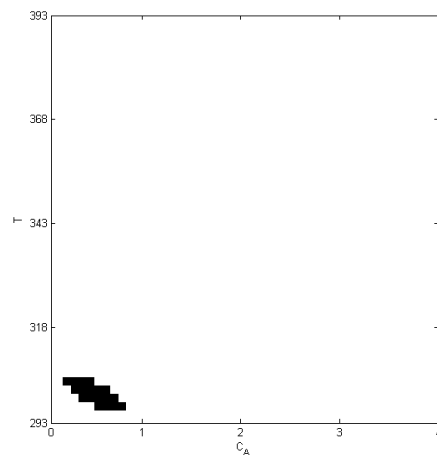
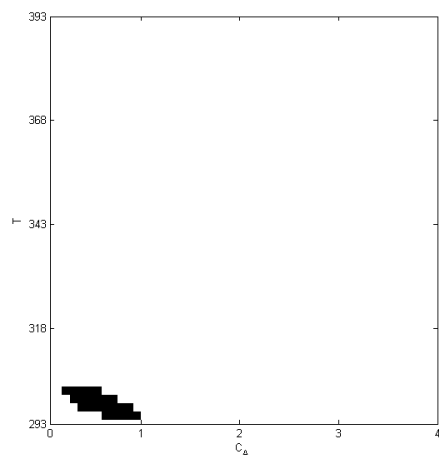
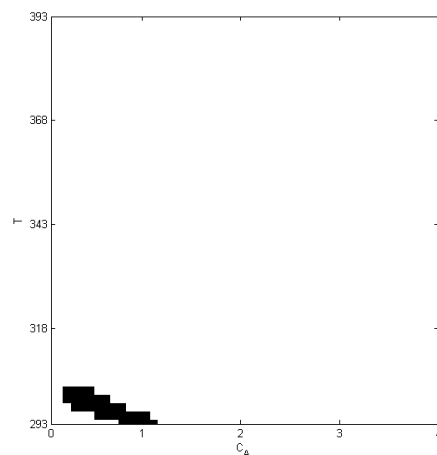
Es importante notar que a medida que aumenta la concentración de A , los conjuntos se van haciendo *porosos*, esto se debe a que para la cota de Chernoff utilizada la densidad de trayectorias por partición en esas zonas muy baja. Este fenómeno se puede contrarrestar aumentando el número de muestras simuladas s o disminuyendo b , el número de particiones del espacio de estados. Es necesario llegar a un compromiso entre estos dos valores pues aumentar s aumenta el costo computacional del cálculo mientras que reducir b reduce la exactitud de la aproximación discreta de $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$.

5.2.3. Cálculo de los conjuntos alcanzables $\mathcal{R}_i(\Omega_0)$

Por medio del algoritmo 1, se calcularon los k conjuntos alcanzables $\mathcal{R}_i(\Omega_0)$. En la figura 5.2 se presentan algunos conjuntos alcanzables en tiempos representativos.

En comparación con los conjuntos controlables, $\mathcal{C}_t(\Omega_0)$; los conjuntos alcanzables son bien definidos. Esto se debe a que su pequeño tamaño hace que al interior del conjunto la densidad de trayectorias sea muy alta.

Figura 5.1.: Evolución temporal del conjunto controlable $\mathcal{C}_t(\Omega_{t_f})$

(a) $t = 0$ (b) $t = 0,8$ (c) $t = 1,6$ (d) $t = 2,4$ (e) $t = 3,2$ (f) $t = 4$ Figura 5.2.: Evolución temporal del conjunto controlable $\mathcal{R}_t(\Omega_0)$

5.2.4. Cálculo del hipervolumen de controlabilidad para Ω_0 , $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ y la función objetivo, $J(\Omega_0)$

Una vez calculados los k conjuntos controlables $\mathcal{C}_t(\Omega_{t_f})$ y alcanzables $\mathcal{R}_t(\Omega_0)$ se pueden calcular los k conjuntos de trayectorias controlables $\mathcal{T}_t(\Omega_0, \Omega_{t_f})$, algunos de los cuales se presentan en la figura 5.3. El valor de $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ se calcula por medio de la ecuación 3.17.

$$\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})} = 3,1104 \left[\frac{\text{molK}}{l} \text{min} \right] \quad (5.8)$$

Con el valor calculado para $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ es posible usar la ecuación 4.5 para calcular el valor de la función objetivo J

$$J(\Omega_0) = 15963,8896 \left[\frac{\text{molK}}{l} \text{min} \right] \quad (5.9)$$

En la figura 5.3 se observa que las intersecciones son muy pequeñas, lo que coincide con los problemas de controlabilidad encontrados por C. A. Gómez (2010).

5.2.5. Optimización de $J(\Omega_0^p)$ para el cálculo de Ω_0^*

El problema de optimización planteado en la Ecuación 4.6 se solucionó por medio del algoritmo de optimización por Quimiotactismo Bacteriano propuesto por García y Álvarez (2009) (Apéndice C). Los valores obtenidos para Ω_0^* fueron:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1(0) &= 2,9199 \left[\frac{\text{mol}}{l} \right] \\ \mathbf{x}_2(0) &= 302,178 \left[K \right] \end{aligned} \quad (5.10)$$

Algunos conjuntos alcanzables $\mathcal{R}_t(\Omega_0^*)$ y de trayectorias controlables $\mathcal{T}_t(\Omega_0^*, \Omega_{t_f})$ representativos se presentan en las figuras 5.4 y 5.5. El valor de $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0^*, \Omega_{t_f})}$ se calcula por medio de la ecuación 3.17.

$$\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0^*, \Omega_{t_f})} = 7,4368 \left[\frac{\text{molK}}{l} \text{min} \right] \quad (5.11)$$

Con el valor calculado para $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0^*, \Omega_{t_f})}$ es posible usar la ecuación 4.5 para calcular el valor de la función objetivo J

$$J(\Omega_0^*) = 1592,5632 \left[\frac{\text{molK}}{l} \text{min} \right] \quad (5.12)$$

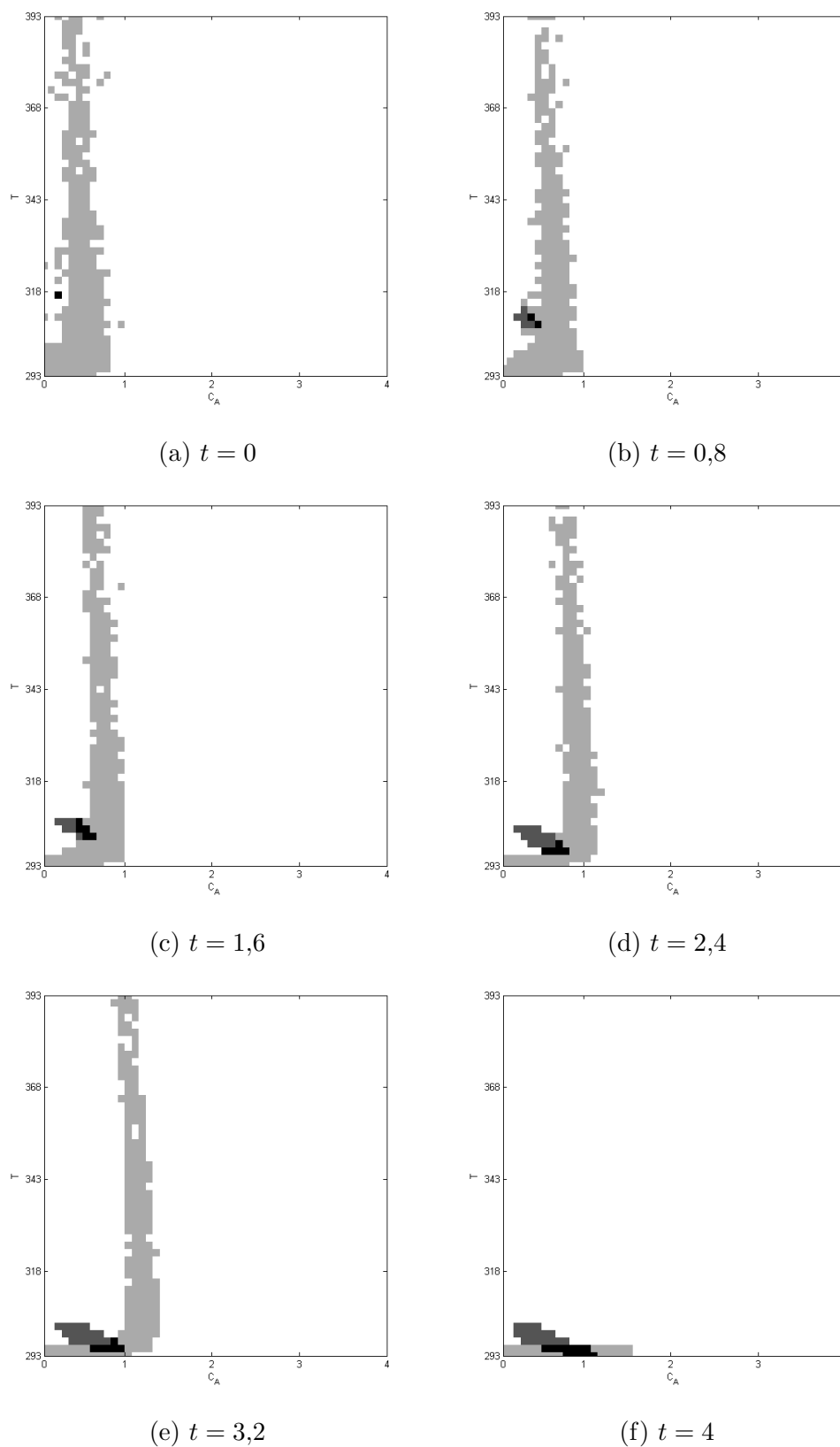
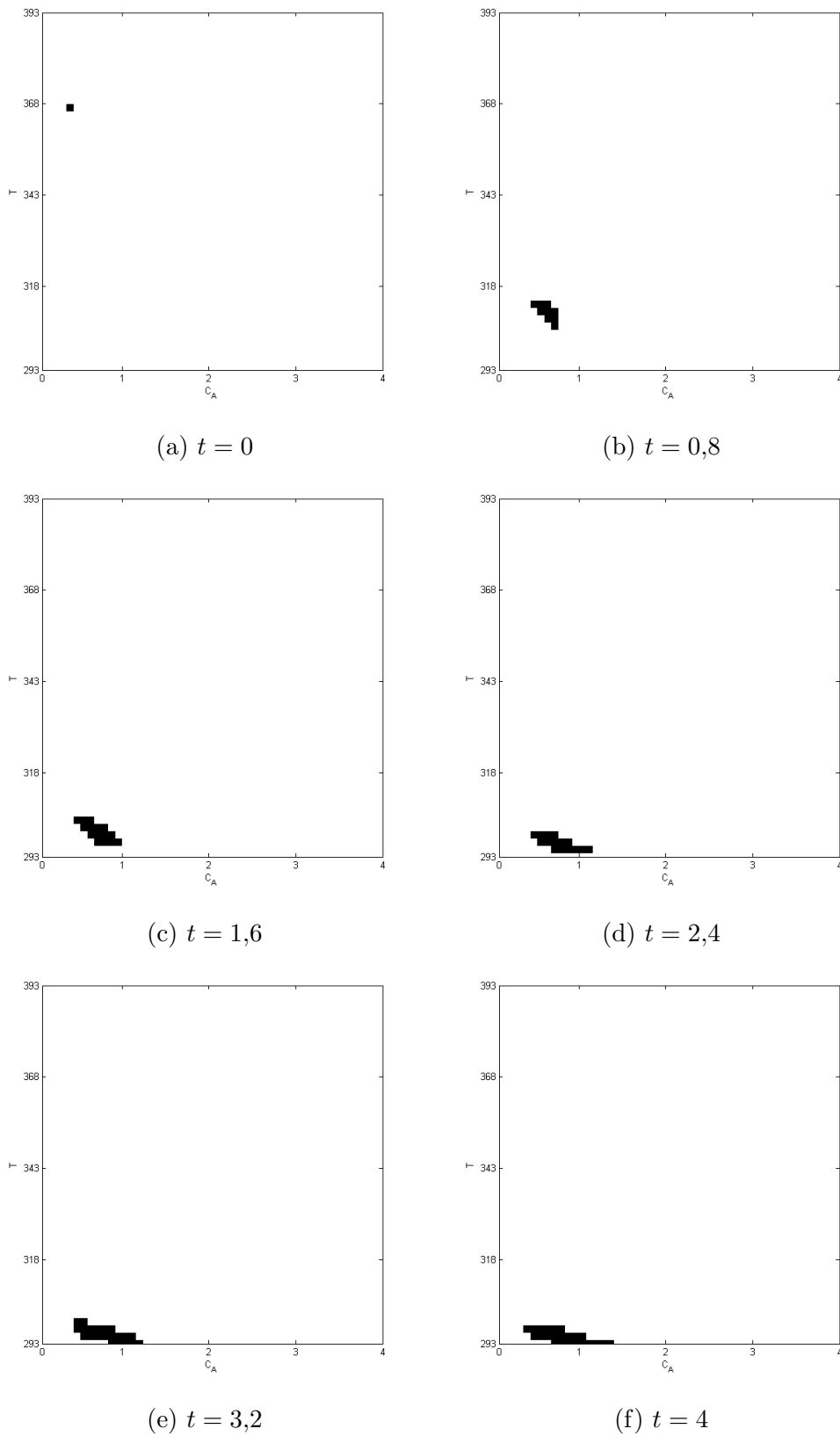


Figura 5.3.: Evolución temporal de los conjuntos: \square Controlable $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$
 \blacksquare Alcanzable $\mathcal{R}(\Omega_0)$ \blacksquare Trayectorias Controlables $\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})$

Figura 5.4.: Evolución temporal del conjunto controlable $\mathcal{R}_t(\Omega_0^*)$

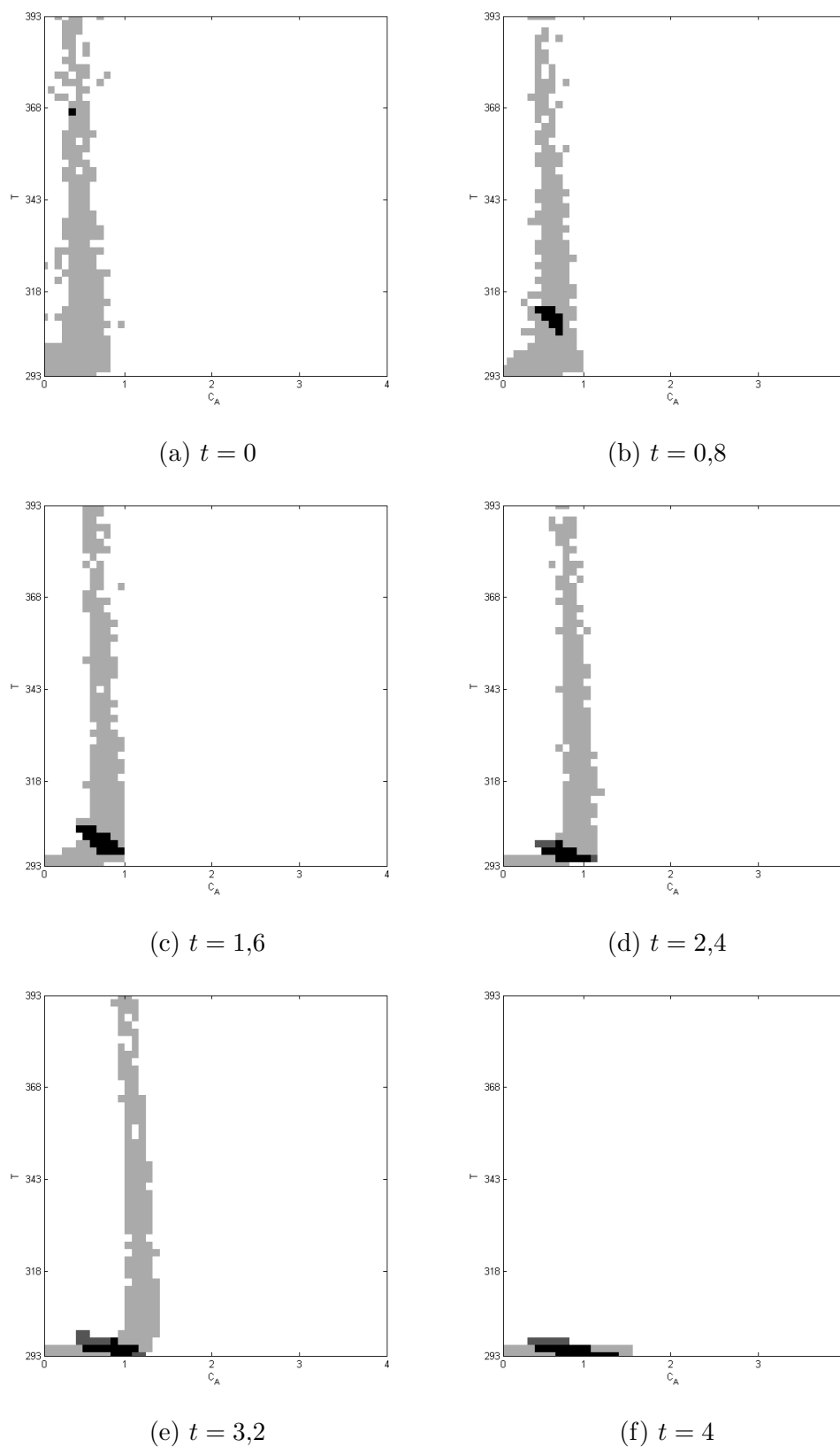


Figura 5.5.: Evolución temporal de los conjuntos: Controlable $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$
 Alcanzable $\mathcal{R}(\Omega_0^*)$ Trayectorias Controlables $\mathcal{T}(\Omega_0^*, \Omega_{t_f})$

5.3. Resultados

Al comparar los resultados presentados en las Ecuaciones 5.8 y 5.11 se observa que el algoritmo de optimización logra aumentar el hipervolumen de controlabilidad a 2.4 veces el valor original. Sin embargo al comparar las Figuras 5.2 y 5.4 se evidencia que los conjuntos alcanzables $\mathcal{R}_t(\Omega_0)$ y $\mathcal{R}_t(\Omega_0^*)$ son muy similares en tamaño siendo el conjunto en las condiciones iniciales óptimas el menor de los dos.

El aumento en el hipervolumen de controlabilidad se debe entonces, no al aumento del hipervolumen de $\mathcal{R}_t(\Omega_0^*)$ con respecto a $\mathcal{R}_t(\Omega_0)$ sino a su desplazamiento dentro del espacio de estados \mathcal{X} . Al comparar las Figuras 5.3 y 5.5 se observa que bajo las condiciones iniciales optimizadas Ω_0^* los conjuntos alcanzables $\mathcal{R}_t(\Omega_0^*)$ son en su mayoría subconjuntos de los conjuntos controlables $\mathcal{C}_t(\Omega_{t_f})$ mientras que en las condiciones iniciales originales hay grandes secciones de los $\mathcal{R}_t(\Omega_0)$ al exterior del conjunto controlable. Al no poder cambiar el tamaño de los $\mathcal{R}_t(\Omega)$ el algoritmo de optimización busca maximizar $\mathcal{R}_t(\Omega) \cap \mathcal{C}_t(\Omega_{t_f})$, la intersección entre los conjuntos controlables y alcanzables minimizando $\mathcal{R}_t(\Omega_0) - \{\mathcal{R}_t(\Omega) \cap \mathcal{C}_t(\Omega_{t_f})\}$.

6. Conclusiones y trabajos futuros

Este trabajo propone el hipervolumen de trayectorias controlables $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ como indicador cuantitativo de la controlabilidad de estado para procesos por lotes. Por medio de este indicador, se propuso una metodología de selección de condiciones iniciales para procesos por lotes que permita una controlabilidad de estado óptima.

6.1. Conclusiones

Efecto de las condiciones iniciales

Por medio de ejemplos se observó que cambiar las condiciones iniciales de un proceso por lotes afectará la controlabilidad de estado de los procesos por lote. Éste efecto se hizo evidente a través de la interacción entre los conjuntos controlables $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$, que no son afectados por las condiciones iniciales y los conjuntos alcanzables $\mathcal{R}(\Omega_0)$, que son afectados directamente. Este efecto permite usar las condiciones iniciales de un proceso por lotes como un parámetro de diseño con el que es posible garantizar una adecuada controlabilidad de estado.

Validez del hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ como indicador de controlabilidad de estado

Se definió el hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ como indicador de controlabilidad de estado para procesos por lotes. Este indicador, desde su definición, es sensible a la dinámica del proceso, las restricciones de estado y de las variables manipuladas, así como a las condiciones iniciales y el tiempo total del lote. Esto permite su uso como criterio de optimalidad para hallar la máxima controlabilidad de estado por medio de la selección de condiciones iniciales óptimas como se ilustró en el Capítulo 5. El hipervolumen de controlabilidad puede usarse también para optimizar la controlabilidad de estado o analizar el efecto de las demás variables que lo afectan.

Uso del hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ para hallar condiciones iniciales óptimas

El hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ es un indicador de controlabilidad de estado que al ser afectado por las condiciones iniciales de un proceso por lotes, permite seleccionar unas condiciones iniciales óptimas. Con este objetivo se formularon algoritmos que permiten determinar numéricamente el hipervolumen de controlabilidad y se planteó una función ob-

jetivo del tipo complemento aditivo que permite su uso con algoritmos de optimización de búsqueda de valores mínimos.

Costo computacional y error en la determinación del hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$

Por medio de la Ecuación 3.11 se determina el número de muestras necesarias para calcular los conjuntos alcanzable $\mathcal{R}(\Omega_0)$ y controlable $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$ con un error y probabilidad de fallo definidos. Este error es independiente de la dimensionalidad del sistema, sin embargo, el error en el que se incurre al discretizar estos conjuntos para calcular el hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ crece con la dimensionalidad del sistema por lo que es de gran importancia reducir al mínimo posible el error inicial en el que se incurre al calcular $\mathcal{R}(\Omega_0)$ y $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$.

Disminuir el error en la determinación de $\mathcal{R}(\Omega_0)$ y $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$ por medio de algoritmos de tipo Monte Carlo requiere aumentar el número de muestras aleatorias de $u(\cdot)$ usadas para resolver el sistema de ecuaciones no lineales que define el proceso (Ecuación 3.3). Ya que la solución del sistema de ecuaciones no lineales es el paso más costoso del algoritmo de cálculo de $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$, aumentar el número de veces que debe ser resuelto causa un aumento significativo en el tiempo de computo. Por este motivo es necesario balancear la precisión necesaria en la determinación $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ para una aplicación determinada, con los recursos computacionales disponibles para su cálculo.

6.2. Trabajos futuros

Incertidumbre en las condiciones iniciales

En este trabajo se asumió un conocimiento total de las condiciones iniciales, sin embargo la incertidumbre en las condiciones iniciales es un problema de gran importancia (Russell et al., 2000). En C. A. Gómez (2010) se propone definir Ω_0 como la región comprendida por la incertidumbre de las condiciones iniciales que rodean a un valor central. Sin embargo, esta aproximación hace que Ω_0 tenga un hipervolumen mucho mayor y dado que $\Omega_0 = \mathcal{R}_0(\Omega_0)$ todos los $\mathcal{R}_t(\Omega_0)$ tendrán hipervolumenes mayores y en consecuencia también los $\mathcal{T}_t(\Omega_0, \Omega_{t_f})$. Este resultado causa que a mayor incertidumbre en las condiciones iniciales haya una mayor controlabilidad de estado, ya que esto es claramente falso, es necesario encontrar una manera alternativa de incorporar la incertidumbre en las condiciones iniciales al análisis de controlabilidad de estado para procesos por lotes.

Métodos para el cálculo de los conjuntos alcanzable $\mathcal{R}(\Omega_0)$, controlable $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$ y de trayectorias controlables $\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})$

Dado el alto costo computacional que implica calcular los conjuntos alcanzable $\mathcal{R}(\Omega_0)$, controlable $\mathcal{C}(\Omega_{t_f})$ y de trayectorias controlables $\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})$ es importante emplear técnicas alternativas de cálculo, como el método por aritmética intervalar propuesto por Bravo et al.

(2005). Es posible comparar no solo la eficiencia computacional de las técnicas de cálculo sino también comparar su precisión en la determinación de la frontera de los conjuntos.

Optimización del tiempo final y las condiciones iniciales para procesos por lotes

En C. A. Gómez (2010) se observa como el tiempo final de lote afecta la controlabilidad de estado de los procesos por lotes. Ya que el hipervolumen de controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$ es un indicador de controlabilidad de estado sensible al tiempo final de lote, es posible plantear un problema de optimización de la controlabilidad de estado de un proceso por lotes en el cual las variables de optimización sean las condiciones iniciales y el tiempo final de lote. Sin embargo es necesario incorporar otros criterios de optimalidad ya que de acuerdo con los resultados obtenidos por (C. A. Gómez, 2010) la mayor controlabilidad se obtendrá para el máximo tiempo de lote permitido por las restricciones a las que se sujete el problema de optimización.

Generalización del hipervolumen e controlabilidad $\eta_{\mathcal{T}(\Omega_0, \Omega_{t_f})}$

El hipervolumen de controlabilidad se definió para procesos por lotes, sin embargo, es posible generalizar su definición para procesos continuos. Esta generalización implicaría un horizonte de control, equivalente a t_f . Un indicador de controlabilidad de estado que implique un horizonte de control puede ser de gran utilidad para el diseño de controladores que usen horizontes de control como el Control Predictivo Basado en Modelo (CPBM).

Referencias

- Alhammadi, H. (2004). Process design and operation Incorporating environmental, profitability, heat integration and controllability considerations. En P. Seferlis y M. C. Georgiadis (Eds.), *Computer aided chemical engineering* (pp. 264–305). Elsevier B. V. Descargado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1570794604800634> doi: 10.1016/S1570-7946(04)80063-4
- Azimzadeh, F., Gala, O., y Romagnoli, J. A. (2006). On-line optimal trajectory control for a fermentation process using multi-linear models. *Computers & Chemical Engineering*, 25(2001), 15–26.
- Banga, J. R., Balsa-Canto, E., Moles, C. G., y Alonso, A. a. (2005, junio). Dynamic optimization of bioprocesses: efficient and robust numerical strategies. *Journal of biotechnology*, 117(4), 407–19. Descargado de <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/15888349> doi: 10.1016/j.jbiotec.2005.02.013
- Bertsekas, D. P., y Rhodes, I. B. (1971). On the Minimax Reachability of Target Sets and Target Tubes. *Automatica*, 7, 233–247.
- Blanchini, F. (1999, noviembre). Set invariance in control. *Automatica*, 35(11), 1747–1767. Descargado de <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0005109899001132> doi: 10.1016/S0005-1098(99)00113-2
- Blanchini, F., y Miani, S. (2008). *Set-theoretic methods in control* (First ed.). Boston: Birkhäuser.
- Bonvin, D. (1998). Optimal operation of batch reactors - a personal view. *Journal of Process Control*, 8, 355–368.
- Bravo, J. M., Limon, D., y Alamo, T. (2005). On the computation of invariant sets for constrained nonlinear systems: An interval arithmetic approach. *Automatica*, 41, 1583–1589. Descargado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0005109805001366> doi: 10.1016/j.automatica.2005.04.015
- Bremermann, H. (1974, mayo). Chemotaxis and optimization. *Journal of the Franklin Institute*, 297(5), 397–404. Descargado de <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0016003274900416> doi: 10.1016/0016-0032(74)90041-6
- Cuthrell, J., y Biegler, L. (1989, enero). Simultaneous optimization and solution methods for batch reactor control profiles. *Computers & Chemical Engineering*, 13(1-2), 49–62. Descargado de <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0098135489890064> doi: 10.1016/0098-1354(89)89006-4
- Dadebo, S., y Mcauley, K. (1995, mayo). Dynamic optimization of constrained chemical engineering problems using dynamic programming. *Computers & Chemical Engineering*, 19(5), 513–525. Descargado de <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0098135494000864> doi: 10.1016/0098-1354(94)00086-4
- Dimian, A. C., y Bildea, C. S. (2004). Component inventory control in recycle systems.

- En P. Seferlis y M. C. Georgiadis (Eds.), *Computer aided chemical engineering* (pp. 401–429). Elsevier B. V. Descargado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1570794604800683> doi: 10.1016/S1570-7946(04)80068-3
- Engell, S., Trierweiler, J. O., Völker, M., y Pegel, S. (2004). Tools and indices for dynamic I/O-controllability assessment and control structure selection. En P. Seferlis y M. C. Georgiadis (Eds.), *Computer aided chemical* (pp. 430–463). Elsevier B. V. Descargado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1570794604800695> doi: 10.1016/S1570-7946(04)80069-5
- Flores-Tlacuahuac, A., y Biegler, L. T. (2007, mayo). Simultaneous mixed-integer dynamic optimization for integrated design and control. *Computers & Chemical Engineering*, 31(5-6), 588–600. Descargado de <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0098135406002316> doi: 10.1016/j.compchemeng.2006.08.010
- García, P., y Álvarez, H. D. (2009). Aplicación de dos Métodos de Inteligencia Artificial y uno de Gradiente para Controladores Predictivos Basados en Modelo no Lineal. En *Memorias del congreso de inteligencia computacional aplicada cica09*. Buenos Aires, Argentina. Descargado de <http://www.palermo.edu/ingenieria/Cica2009/Papers/56.pdf>
- Gómez, C. A. (2010). *Control Predictivo Basado en Modelo (CPBM) con Estabilidad Garantizada en Procesos por Lotes*. Tesis de maestría, Universidad Nacional de Colombia.
- Gómez, L. M. (2009). *Una Aproximación al Control de los Procesos por Lotes*. Tesis doctoral, Universidad Nacional de San Juan.
- Gómez, L. M., Álvarez, H. D., Peña, M., y di Sciascio, F. (2008). La Reversibilidad en el Control de los Procesos por Lotes. En *Xiii congreso latinoamericano de control automático* (pp. 549–556). Mérida.
- Guzmán, M. A., Delgado, A., y De Carvalho, J. (2010, abril). A novel multiobjective optimization algorithm based on bacterial chemotaxis. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 23(3), 292–301. Descargado de <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0952197609001328> doi: 10.1016/j.engappai.2009.09.010
- Hermann, R., y Krener, A. J. (1977, octubre). Nonlinear controllability and observability. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 22(5), 728–740. Descargado de http://ieeexplore.ieee.org/xpls/abs_all.jsp?arnumber=1101601 doi: 10.1109/TAC.1977.1101601
- Isidori, A. (1995). *Non Linear Control Systems* (Tercera ed.). Londres: Springer.
- Johansen, T. (1997). Operating regime based process modeling and identification. *Computers & Chemical Engineering*, 21(2), 159–176. Descargado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S009813549500260X>
- Kalman, R. (1959). On the general theory of control systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 4(3), 110–110. Descargado de <http://ieeexplore.ieee.org/lpdocs/epic03/wrapper.htm?arnumber=1104873> doi: 10.1109/TAC.1959.1104873
- Karafyllis, I., y Kokossis, a. (2002, marzo). On a new measure for the integration of process design and control: the disturbance resiliency index. *Chemical Engineering Science*, 57(5), 873–886. Descargado de <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0009250901004213> doi: 10.1016/S0009-2509(01)00421-3
- Kearns, D. B., y Shimkets, L. J. (1998, septiembre). Chemotaxis in a gliding bacterium.

- Proceedings of the National Academy of Sciences*, 95(20), 11957–11962. Descargado de <http://www.pnas.org/cgi/content/abstract/95/20/11957> doi: 10.1073/pnas.95.20.11957
- Kerrigan, E. C. (2000). *Robust Constraint Satisfaction : Invariant Sets and Predictive Control*. Tesis doctoral, University of Cambridge.
- Kookos, I. K., y Perkins, J. D. (2004). The back-off approach to simultaneous design and control. En P. Seferlis y M. C. Georgiadis (Eds.), *Computer aided chemical engineering* (pp. 216–238). Elsevier B. V. Descargado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1570794604800610> doi: 10.1016/S1570-7946(04)80061-0
- Lee, J., y Lee, K. (2000). Model-based iterative learning control with a quadratic criterion for time-varying linear systems. *Automatica*, 36, 641–657. Descargado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0005109899001946>
- Lee, K. S., y Lee, J. H. (2003, octubre). Iterative learning control-based batch process control technique for integrated control of end product properties and transient profiles of process variables. *Journal of Process Control*, 13(7), 607–621. Descargado de <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0959152402000963> doi: 10.1016/S0959-1524(02)00096-3
- Mc Avoy, T., Arkun, Y., Chen, R., Robinson, D., y Schnelle, P. (2003, agosto). A new approach to defining a dynamic relative gain. *Control Engineering Practice*, 11(8), 907–914. Descargado de <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0967066102002071> doi: 10.1016/S0967-0661(02)00207-1
- Özkan, G., Özen, S., Erdogan, S., Hapoglu, H., y Albaz, M. (2001, mayo). Non-linear control of polymerization reactor. *Computers & Chemical Engineering*, 25(4-6), 757–763. Descargado de <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0098135401006512><http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135401006512> doi: 10.1016/S0098-1354(01)00651-2
- Russell, S. A., Robertson, D. G., y Lee, J. H. (1998). Control of product quality for batch nylon 6, 6 autoclaves. *Chemical Engineering Science*, 53(21), 3685–3702. Descargado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250998001481>
- Russell, S. A., Robertson, D. G., Lee, J. H., y Ogunnaike, B. A. (2000, agosto). Model-based quality monitoring of batch and semi-batch processes. *Journal of Process Control*, 10(4), 317–332. Descargado de <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0959152499000475> doi: 10.1016/S0959-1524(99)00047-5
- Salomone, H., y Montagna, J. (1997, mayo). A simulation approach to the design and operation of multiproduct batch plants. *Chemical Engineering Research and Design*, 75(4), 427–437. Descargado de <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0263876297715478><http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0263876297715478> doi: 10.1205/026387697523895
- Sendin, O. H., Moles, C. G., Alonso, A. A., y Banga, J. R. (2004). Multi-objective integrated design and control using stochastic global optimization methods. En P. Seferlis y M. C. Georgiadis (Eds.), *Computer aided chemical* (pp. 555–581). Elsevier B. V. Descargado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1570794604800749> doi: 10.1016/S1570-7946(04)80074-9
- Sontag, E. D. (1998). *Mathematical control theory: deterministic finite dimensional systems*

- (Second ed.). New York: Springer. Descargado de <http://www.math.rutgers.edu/~sonntag/mct.html>
- Spiro, P. A., Parkinson, J. S., y Othmer, H. G. (1997, julio). A model of excitation and adaptation in bacterial chemotaxis. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 94(14), 7263–7268. Descargado de <http://www.pnas.org/cgi/content/abstract/94/14/7263> doi: 10.1073/pnas.94.14.7263
- Srinivasan, B., y Bonvin, D. (2007). Controllability and stability of repetitive batch processes. *Journal of Process Control*, 17, 285–295. doi: 10.1016/j.jprocont.2006.10.009
- Srinivasan, B., Palanki, S., y Bonvin, D. (2003). Dynamic optimization of batch processes I. Characterization of the nominal solution. *Computers & Chemical Engineering*, 27.
- Tsai, P., y Jang, S. (2001). Predictive control of batch processes using principal surface/space analysis and fuzzy clustering empirical models. En *American control conference*, (pp. 1005–1009). Descargado de http://ieeexplore.ieee.org/xpls/abs_all.jsp?arnumber=945852
- Vidyasagar, M. (1998). Statistical learning theory and randomized algorithms for control. *IEEE Control Systems Magazine*, 18(6), 69–85. Descargado de <http://ieeexplore.ieee.org/lpdocs/epic03/wrapper.htm?arnumber=736014> doi: 10.1109/37.736014
- Warnes, M., Glassey, J., y Montague, G. (1996). On data-based modelling techniques for fermentation processes. *Process Biochemistry*, 31(2), 147–155. Descargado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0032959295000437>
- Xiong, Q., Cai, W.-J., y He, M.-J. (2005, octubre). A practical loop pairing criterion for multivariable processes. *Journal of Process Control*, 15(7), 741–747. Descargado de <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0959152405000375> doi: 10.1016/j.jprocont.2005.03.008
- Zheng, A., y Mahajanam, R. V. (1999, marzo). A Quantitative Controllability Index. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 38(3), 999–1006. Descargado de <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie980337y> doi: 10.1021/ie980337y

A. El proceso de fermentación de la penicilina

El proceso de fermentación de la penicilina puede considerarse como un problema de referencia (*benchmark*), debido a que ha sido ampliamente utilizado con el fin de evaluar diferentes técnicas o algoritmos de optimización dinámica. En este caso, se utilizan los trabajos realizados por [Banga et al. \(2005\)](#) y [Srinivasan et al. \(2003\)](#). Sin embargo, este proceso se ha venido utilizando desde la década de los ochenta con el trabajo de [Cuthrell y Biegler \(1989\)](#) y posteriormente por [Dadebo y Mcauley \(1995\)](#), entre otros.

Las características más sobresalientes del proceso de fermentación de la penicilina son:

Reacción $S \rightarrow X, S \rightarrow P$

Condiciones Reactor semi-lote isotérmico

Objetivo Maximizar la producción de penicilina (P) en un tiempo fijo.

Variable manipulada Velocidad de alimentación de S

Restricciones Entrada acotada, límite superior de la concentración de biomasa (X)

El término de velocidad de crecimiento $\mu(S)$ contiene un término de inhibición debido al cual, el valor óptimo del sustrato debería ser el correspondiente a $\frac{d\mu}{dS} = 0$, $S^* = \sqrt{K_m K_i}$, para incrementar X y por lo tanto P . Sin embargo, existe una restricción en la concentración de biomasa (X) debido a la limitación a la transferencia de oxígeno que ocurre en grandes concentraciones de biomasa.

La formulación matemática del proceso de producción de penicilina se presenta en la ecuación [A.1](#):

$$\dot{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \mu \frac{\mathbf{x}_1}{Y_1} - \rho \frac{\mathbf{x}_1}{Y_2} - m \frac{\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2}{K_m + \mathbf{x}_2} \\ \rho \mathbf{x}_1 - k \mathbf{x}_3 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\frac{\mathbf{x}_1}{S_F \mathbf{x}_4} \\ \frac{1}{\mathbf{x}_4} - \frac{\mathbf{x}_2}{S_F \mathbf{x}_4} \\ -\frac{\mathbf{x}_3}{S_F \mathbf{x}_4} \\ \frac{1}{S_F} \end{bmatrix} u \quad (\text{A.1})$$

con $\mu(S) = \frac{\mu_m \mathbf{x}_1}{K_m + \mathbf{x}_1 + \frac{\mathbf{x}_1^2}{k}}$

Donde \mathbf{x}_1 es la concentración de sustrato; \mathbf{x}_2 la concentración de biomasa; \mathbf{x}_3 la concentración de penicilina; \mathbf{x}_4 el volumen del reactor; u el flujo de alimentación; S_F la concentración de sustrato en el flujo de alimentación; μ_m , K_m y k son parámetros cinéticos; y tanto Y_1 como Y_2 son parámetros de rendimiento. Los parámetros usados fueron tomados de ([Banga et al., 2005](#))

B. Modelo de un reactor por lotes (J. Lee y Lee, 2000)

J. Lee y Lee (2000) proponen un modelo para un reactor por lotes para ilustrar el comportamiento de un controlador basado en modelo con aprendizaje iterativo. Este modelo fue retomado en (C. A. Gómez, 2010) donde se usó para la síntesis de un controlador predictivo basado en modelo con estabilidad garantizada. C. A. Gómez (2010) también usó este modelo para mostrar el efecto del tiempo total de lote sobre la controlabilidad de estado de un proceso por lotes (Figura B.1).

Las características más sobresalientes del proceso por lotes genérico de (J. Lee y Lee, 2000) son:

Reacción $A \rightarrow B$ exotérmica.

Condiciones Reactor por lotes no isotérmico, con chaqueta para control de temperatura.

Objetivo Alcanzar un rango concentración de A dentro de un rango de temperatura (condiciones finales del producto).

Variable manipulada Temperatura de la chaqueta.

Restricciones Entrada acotada, límites superior e inferior en la concentración y la temperatura.

La formulación matemática del proceso se presenta en la ecuación B.1:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}}_1 &= -k_0 \mathbf{x}_1^2 e^{-\frac{E}{R\mathbf{x}_2}} \\ \dot{\mathbf{x}}_2 &= -\frac{UA}{MC_p}(\mathbf{x}_2 - u) + \frac{-\Delta HV}{MC_p} k_0 e^{-\frac{E}{R\mathbf{x}_2}}\end{aligned}\tag{B.1}$$

Donde \mathbf{x}_1 es la concentración de A , C_A ; \mathbf{x}_2 la temperatura del reactor, T ; y u es la temperatura de la chaqueta de control de temperatura, T_j .

Los parámetros del modelo son tomados de (J. Lee y Lee, 2000)

$$\begin{aligned}\frac{UA}{MC_p} &= 0,09 && \left[\frac{l}{min}\right] \\ -\Delta HV &= 1,64 && \left[\frac{Kl}{min}\right] \\ k_0 &= 2,53 \times 10^{19} && \left[\frac{minmol}{l}\right] \\ \frac{E}{R} &= 13550 && [K]\end{aligned}\tag{B.2}$$

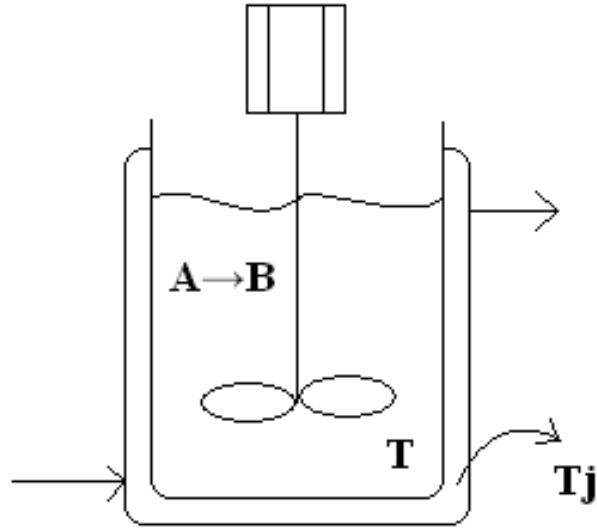


Figura B.1.: Reactor por lotes con chaqueta de enfriamiento

La variable manipulada está sujeta a las siguientes restricciones (C. A. Gómez, 2010):

$$\begin{aligned} u &\geq 293 \text{ [K]} \\ u &\leq 369 \text{ [K]} \end{aligned} \tag{B.3}$$

C. A. Gómez (2010) optimizó el tiempo final de lote para este proceso buscando el tiempo de lote mínimo. Sin embargo, este resultado produjo un sistema con una mínima controlabilidad causada por la constante saturación de la variable manipulada. Debido a esto, se estableció un tiempo final de lote que permite una controlabilidad adecuada.

$$t_f = 4 \tag{B.4}$$

C. Optimización por quimiotactismo bacteriano

El algoritmo de Quimiotactismo Bacteriano (QB o Bacterial Chemotaxis en inglés) fue originalmente propuesto en (Bremermann, 1974) como una optimización numérica de los pesos de una red neuronal artificial de propagación hacia delante y ha sido desarrollado otros trabajos entre los que se destaca (Guzmán, Delgado, y De Carvalho, 2010).

El mecanismo de búsqueda del óptimo por QB imita el movimiento típico de una colonia de bacterias dentro de un caldo de cultivo. Tales movimientos son una función directa de la concentración de nutrientes en dicho caldo de cultivo. La funcionalidad del movimiento se logra por un cierto código de comunicación que provee información sobre la concentración de nutrientes en varias direcciones alrededor de la posición actual de la colonia. El movimiento que finalmente dará la colonia en el próximo instante será en aquella dirección en la que la concentración de nutrientes incremente (Kearns y Shimkets, 1998; Spiro, Parkinson, y Othmer, 1997). El mismo criterio de movimiento en busca de un óptimo matemático se aplica durante las búsquedas numéricas de un máximo (o de un mínimo tomando el recíproco de la función) de cualquier función multi-variable.

En un primer paso del algoritmo de QB se determinan los intervalos nominales y se establece un valor semilla para cada u_k que se va a optimizar. De este modo el algoritmo de QB inicia su trabajo explorando varias direcciones en el espacio de los parámetros. El algoritmo de QB básico puede ser descrito como la siguiente secuencia de pasos, considerando una única bacteria como si fuera la colonia completa:

Algoritmo 5 (Optimización por Quimiotactismo Bacteriano). *Para una función objetivo $J(U)$ y una matriz de variables de optimización U :*

1. *Tomar de manera provisional el valor semilla de cada uno de los U_k como U_0 . Calcular el valor de la función de objetivo $J(U)$ con los valores actuales U_0 y tomar dicho valor como el óptimo inicial J_0 .*
2. *Considerando las restricciones de U (U_{min} , U_{max}), determinar aleatoriamente la matriz de términos de suma S con las mismas dimensiones de U . Este procedimiento acepta valores negativos o positivos la matriz.*
3. *Calcular un nuevo U usando la matriz S : $U_p = U_n + S$*
4. *Determina el valor de la función de objetivo $J_p = J(U_p)$.*
5. *Si $J_p > J_n$ entonces U_p se almacena como U_{n+1} y se mantiene el S actual. Si $J_p \leq J_n$ se mantiene el U_n original y se determina aleatoriamente un nuevo S . Si se genera*

un cierto número de S que producen pasos no válidos, se reduce el intervalo para la generación de S y se vuelve al paso 2.

- 6. Si todavía no se cumple la condición de parada del algoritmo, se retorna al paso 3. De lo contrario, el algoritmo termina entregando como respuesta el U_n actual.*

Respecto a la condición de parada del algoritmo, existen tres alternativas. La primera considera un número fijo de ciclos de reducción del intervalo de generación de la matriz S . La segunda es un número máximo de pasos válidos. La tercera consiste en evaluar el cambio en el valor de la función objetivo, si $|J_n - J_{n+1}| < tol$, donde tol es un valor de tolerancia, la optimización concluye.