



UNIVERSIDAD
DE BURGOS



Actas del Simposio Conjunto de los Grupos Temáticos de CEA

Modelado, Simulación, Optimización e Ingeniería de Control

Burgos 27 - 29 de abril de 2022

Editores:
Daniel Sarabia Ortiz
Alejandro Merino Gómez



ACTAS DEL SIMPOSIO CONJUNTO DE LOS GRUPOS TEMÁTICOS
DE CEA MODELADO, SIMULACIÓN, OPTIMIZACIÓN E
INGENIERÍA DE CONTROL

EDITORES:

DANIEL SARABIA ORTIZ,
ALEJANDRO MERINO GÓMEZ

Abril de 2022

ISBN: 978-84-09-41387-4

Las actas del Simposio Conjunto de los Grupos Temáticos de CEA. Modelado, Simulación, Optimización e Ingeniería de Control están sujetas a una licencia Creative Commons Attribution 4.0 International License.



Índice

Modelado de un Fotobiorreactor en una configuración Reactor Anóxico-Fotobiorreactor Irina Bausa, Raúl Muñoz, Smaranda Podar, César de Prada	1
Desarrollo de un modelo de bi-equilibrio para la gasificación de biomasa residuales en un reactor de lecho ascendente. Febles R. Arian, Alonso A. Lara, Feroso D. Jose, Verdugo G. Francisco, Pérez S. Jorge, Mazaeda E. Rogelio, Gutiérrez R. Gloria	7
Modelado multi-escala y optimización de la dinámica de resistencia bacteriana a antimicrobianos Nerea Martínez-López, Carlos Vilas, Míriam R. García	13
Modelado dinámico y control de un fotobiorreactor de microalgas soportadas. Optimización de las condiciones de operación. Felipe Palacios, Gonzalo Salazar, Carlos Rad, Daniel Sarabia.....	15
Modelado e Identificación de una plataforma de control de temperatura – Sistema MIMO – a partir de entradas tipo escalón Rogelio Rivero-Contreras, Jesús María Zamarreño, Fernando Tadeo	17
Minimización de riesgo en programación de operaciones de crudos en una refinería Tomás García García-Verdier, Gloria Gutiérrez, Carlos Méndez, Carlos G. Palacín, César de Prada.....	22
Estrategias avanzadas de control predictivo aplicadas a sistemas solares térmicos Igor M. L. Pataro, Juan D. Gil, José L. Guzmán, Manuel Berenguel	28
Descomposición de Problemas de Scheduling de Dos Etapas Usando un Índice de Similitud Daniel Montes, José Luis Pitarch, César de Prada.....	34
Integración de Control Predictivo Económico y Metodología de Adaptación de Modificadores Erika Oliveira-Silva, Cesar de Prada, Daniel Navia	39
Gestión de una simulación distribuida de un modelo dinámico en la industria de procesos Fernando Gutiérrez, Rogelio Mazaeda, Jesús M. Zamarreño	41
Control de formación basado en eventos para Crazyflie 2.1 Francisco José Mañas Álvarez, María Guinaldo, Raquel Dormido, Rafael Socas, Sebastián Dormido.....	47
Modelado y control del proceso de producción de microalgas mediante estrategias de aprendizaje automático Pablo Otálora, José Luis Guzmán, Francisco Gabriel Ación, Manuel Berenguel.....	53
ANN based estimator for permeate quality in RO processes A. Ruiz-García, I. Nueza, F. Tadeo	59
Aprendizaje por Refuerzo profundo para la negociación en control predictivo distribuido cooperativo de sistemas complejos Óscar E. Aponte, Pastora Vega, Mario Francisco.....	63



Modelado de un Fotobiorreactor en una configuración Reactor Anóxico-Fotobiorreactor



Irina Bausa^{*a,b}, Raúl Muñoz^{a,c}, Smaranda Podar^{a,b}, César de Prada^{a,b}

^a Instituto de Procesos Sostenibles. Universidad de Valladolid. C/ Doctor Mergelina s/n, 47011, Valladolid, España

^b Departamento de Ingeniería de Sistemas y Automática. Universidad de Valladolid. C/ Real de Burgos s/n, 47011, Valladolid, España.

^c Departamento de Ingeniería Química y Tecnología del Medio Ambiente. Universidad de Valladolid. C/ Doctor Mergelina s/n, 47011, Valladolid, España

Resumen

En los últimos años, las tecnologías de depuración de aguas residuales basadas en consorcios microalgas-bacterias han generado un interés creciente dentro de la comunidad científica. Las directivas medioambientales de la Unión Europea en cuanto a los procesos de tratamiento de aguas residuales; la gestión eficiente de los nutrientes; y el tránsito hacia una economía hipocarbónica, eficiente en el uso de los recursos, ecológica y competitiva, han reactivado el interés por estas tecnologías y el desarrollo de un gran número de mejoras y aplicaciones (CEE, 1991), (EEE, 2013), (European Comission, 2000).

En este trabajo se presenta el modelado del fotobiorreactor empleado en una configuración reactor anóxico- fotobiorreactor de algas y bacterias con recirculación de biomasa para el tratamiento de aguas residuales domésticas, desarrollada en la Universidad de Valladolid (Alcántara, et al., 2015). El modelo permite estimar la concentración de varios componentes en el fotobiorreactor. Con el fin de ajustar el modelo a los datos experimentales, se realiza la estimación mediante optimización dinámica de los principales parámetros que influyen sobre las salidas del modelo. El modelo obtenido se valida mediante simulación, comparando los resultados del mismo con los datos experimentales. La optimización, modelado y simulación del proceso se realizan en el entorno de simulación dinámica EcosimPro®.

1. Introducción

Desde finales de los años 50, las microalgas se han empleado a pequeña escala para el tratamiento de aguas residuales. Los sistemas de depuración basados en consorcios microalgas-bacterias han demostrado ser una opción prometedora para la eliminación de nutrientes de las aguas residuales (Muñoz & Guieysse, 2006). Las microalgas son organismos fotosintéticos que producen oxígeno (O₂) y eliminan carbono (C), nitrógeno (N) y fósforo (P) del agua residual. Las bacterias aerobias utilizan el oxígeno producido por las microalgas para estabilizar la materia orgánica, a la vez que liberan dióxido de carbono (CO₂) y nutrientes necesarios para el crecimiento de las microalgas. Estos sistemas de tratamiento reducen significativamente el consumo de energía respecto a los sistemas convencionales de depuración basados en lodos activos, debido a que no requieren aireación mecánica. Además, la biomasa microalgal obtenida en los sistemas de tratamiento de aguas residuales puede ser cosechada para su aplicación en diferentes aspectos: como suplemento o complemento de la alimentación animal, producción de biofertilizantes, bioestimulantes, bioplástico y biodiesel (Acien, et al., 2013), (Brennan & Owende, 2010), (Chae & Kang, 2013).

El número creciente de aplicaciones de tecnologías basadas en microalgas ha fomentado el desarrollo de nuevos modelos para el estudio de los principales procesos, factores y variables que influyen en el crecimiento de las microalgas en diferentes medios de cultivo, incluyendo las aguas residuales (Casagli, et al., 2021), (Solimeno, et al., 2017), (Solimeno, et al., 2019).

Muchos de los procesos que tienen lugar en los sistemas de tratamiento de aguas residuales basados en consorcios microalgas-bacterias tienen lugar a diferente escala de tiempo y son interdependientes (García, et al., 2006). Las reacciones entre microalgas y bacterias cambian en el tiempo debido a la

variación diaria de variables medioambientales como la radiación solar y la temperatura, además de variables operacionales como el tiempo de retención hidráulico (*Hydraulic Retention Time, HRT*), concentración de nutrientes y la carga orgánica presente en el agua residual. Para el diseño apropiado de sistemas de tratamiento de aguas residuales basados en consorcios microalgas-bacterias es necesario el desarrollo de modelos completos que integren los procesos físicos, químicos y biológicos que tienen lugar en estos sistemas (Solimeno, et al., 2019). Los modelos matemáticos ofrecen una gran oportunidad para estudiar simultáneamente el efecto de los múltiples factores que afectan a las microalgas y bacterias, permitiendo así la predicción de la producción final de biomasa y contribuyendo a la optimización del diseño del sistema en términos de operación y control (Solimeno & García, 2017).

Recientemente, otra de las líneas de investigación que ha generado gran interés es el diseño y mejora de instalaciones que optimicen el rendimiento de la biomasa de algas y garanticen la adecuada depuración de las aguas residuales. En este sentido, en (De Godos, et al., 2014) se propone una configuración de reactor anóxico-reactor aerobio para eliminar el nitrógeno y fósforo del agua residual y mejorar la sedimentación de biomasa microalgal. Esta instalación fue optimizada en (Alcántara, et al., 2015) con el objetivo de promover la eliminación de nitrógeno vía desnitrificación y el desarrollo de una rápida sedimentación de la población de microalgas-bacterias. El objetivo de este trabajo es modelar el fotobiorreactor utilizado en (Alcántara, et al., 2015) y determinar los valores óptimos de los parámetros del modelo. El modelado y simulación del proceso se realizan en el entorno de simulación dinámica EcosimPro®.

El trabajo está estructurado en seis secciones: a continuación, se realiza la descripción de la planta. En la Sección 3 se hace referencia al modelado del fotobiorreactor. La Sección 4 está dedicada al procedimiento de estimación de

parámetros. En la Sección 5 se presentan los resultados de simulación del modelo, y, por último, se presentan las conclusiones.

2. Descripción de la planta

La instalación experimental consta de un reactor anóxico interconectado con un fotobiorreactor, tal como se representa en el diagrama en bloques de la Figura 1.

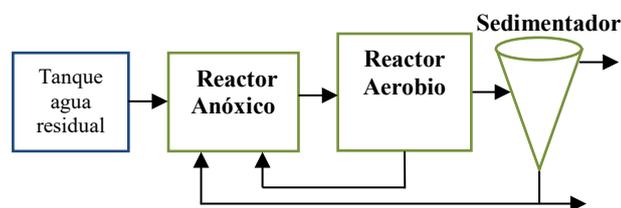


Figura 1: Diagrama en bloques de la configuración reactor anóxico-fotobiorreactor aerobio

El reactor aerobio (fotobiorreactor) es un tanque encamisado de vidrio de 3.5 L (AFORA, España) con un volumen de trabajo total de 2.7 L. El fotobiorreactor fue iluminado de manera continua por tiras de luces LED de 4×5 metros (F30W-12V, España) colocadas de forma circular, las cuales proveen una iluminación de $400 \pm 51 \mu\text{E}/\text{m}^2 \text{ s}$ en la pared externa del fotobiorreactor. La temperatura y la agitación magnética del fotobiorreactor se mantuvieron constantes a $24 \pm 1^\circ\text{C}$ y 300 rpm, respectivamente, mientras que el pH se mantuvo a 7.8 ± 0.1 mediante la adición diaria de 0.8 mL de ácido clorhídrico (37 %).

El reactor anóxico consiste en un tanque hermético de cloruro de polivinilo de 1L con un volumen de trabajo total de 0.9L, este tanque se mantuvo en la oscuridad y agitado continuamente a 300 rpm.

El agua residual sintética utilizada en los experimentos fue previamente esterilizada a 121°C durante 20 min y se mantuvo a 7°C .

El reactor anóxico se alimenta con agua residual sintética y el reactor aerobio se alimenta continuamente por gravedad con el flujo de rebose del reactor anóxico. El cultivo de microalgas-bacterias se recirculó de manera continua con un flujo de 3 L/d desde el fotobiorreactor al tanque anóxico con el objetivo de suministrar los nitritos (NO_2^-) y nitratos (NO_3^-) (generados en el fotobiorreactor mediante nitrificación biológica) requeridos para la desnitrificación. La temperatura del reactor anóxico se mantuvo constante a $24 \pm 1^\circ\text{C}$. Un cono de Imhoff de 1 L de volumen interconectado con la salida del fotobiorreactor se utilizó como sedimentador. La biomasa de microalgas-bacterias sedimentada se recirculó desde el fondo del sedimentador hacia el tanque anóxico a 0.5 L/d y se purgó tres veces a la semana con el objetivo de controlar el tiempo de retención de lodos (*Sludge Retention Time, SRT*) del consorcio microalgas bacterias.

2.1 Experimentación

En (Alcántara, et al., 2015) se recogen los resultados de los experimentos realizados con el objetivo de estimular la eliminación de nitrógeno del agua residual. Se tomaron 100 mL de muestras líquidas tres veces a la semana del agua residual sintética, tanque anóxico, tanque aerobio, purga y

efluente clarificado, con el fin de monitorear las concentraciones del Total de Carbono Orgánico (*Total Organic Carbon, TOC*) disuelto, Carbono Inorgánico (*Inorganic Carbon, IC*) disuelto, especies de nitrógeno disueltas (nitrógeno total, N- NH_4^+ , N- NO_2^- , N- NO_3^-) y concentración de biomasa, expresada como Total de Sólidos en Suspensión (*Total Suspended Solids, TSS*). La Concentración de Oxígeno Disuelto (*Dissolved Oxygen Concentration, DOC*), la temperatura y el pH del medio de cultivo en ambos tanques se midieron in situ diariamente.

En la Tabla 1 se recogen las condiciones de experimentación bajo las cuales se obtuvieron los datos para este trabajo.

Tabla 1: Condiciones del experimento. Los valores de parámetros corresponden a valores medios \pm desviación estándar

Parámetros operacionales	Valor
Duración del experimento (d)	47
HRT (d)	4
SRT (d)	27 ± 5
Flujo de agua residual (L/d)	0.9 ± 0.1
Flujo de recirculación interna (L/d)	3
Flujo de recirculación externa (L/d)	0.5
Intensidad de la luz ($\mu\text{E}/\text{m}^2\text{s}$)	420 ± 21

3. Modelo del proceso

En las últimas dos décadas, se han propuesto varios modelos para representar las interacciones microalgas- bacterias (Reichert, et al., 2001), (Solimeno, et al., 2017), (Solimeno, et al., 2019), (Casagli, et al., 2021), (Sánchez-Zurano, et al., 2021). La revisión de estos modelos ha permitido elegir el modelo BIO_ALGAE 2 (Solimeno, et al., 2019) para el desarrollo del presente trabajo, debido a que el mismo incluye las interacciones microalgas-bacterias, sin presentar una complejidad excesiva. El modelo BIO_ALGAE 2, aplicado al sistema descrito en (Alcántara, et al., 2015), se ha utilizado para describir las relaciones fundamentales que tienen lugar en el reactor anóxico y el fotobiorreactor, mientras que el sedimentador se ha modelado utilizando expresiones de balance de masas (Bausa, et al., 2021). El modelado y simulación dinámica EcosimPro® (Empresarios Agrupados Internacional, 2021).

El modelo BIO_ALGAE utiliza la nomenclatura de los modelos de la Asociación Internacional del Agua (*International Water Association, IWA*) y considera 19 componentes (6 particulados y 13 disueltos) implicados como variables en los procesos físicos, químicos y biocinéticos. En (Solimeno, et al., 2017) se describen estos componentes, el papel que desempeñan en los procesos que tienen lugar en los fotobiorreactores y las interacciones con otros componentes. En la Tabla 2 se muestra un resumen de los componentes utilizados en el modelo.

En este trabajo se presenta el modelado del fotobiorreactor, teniendo en cuenta que la alimentación de este reactor es el flujo de rebose proveniente del reactor anóxico. Se consideran como salidas del modelo las variables medidas: Total de Sólidos en Suspensión, Total de Carbono Orgánico disuelto, Total de Carbono Inorgánico disuelto, Oxígeno Disuelto y Amonio disuelto (N- NH_4).

Tabla 2: Descripción de los componentes del modelo

Componentes - Descripción	Unidades
S_{NH4} - Nitrógeno amónico	mgN-NH ₄ L ⁻¹
S_{NH3} - Nitrógeno amoniacal	mgN-NH ₃ L ⁻¹
S_{NO3} - Nitrato	mgN-NO ₃ L ⁻¹
S_{NO2} - Nitrito	mgN-NO ₂ L ⁻¹
S_{CO2} - Dióxido de carbono	mgC-CO ₂ L ⁻¹
S_{HCO3} - Bicarbonato	mgC-HCO ₃ L ⁻¹
S_{CO3} - Carbonato	mgC-CO ₃ L ⁻¹
S_{PO4} - Fosfato	mgP-PO ₄ L ⁻¹
S_{O2} - Oxígeno disuelto	mgO ₂ L ⁻¹
S_H - Iones hidrógeno	mgH L ⁻¹
S_{OH} - Iones hidróxido	mgH-OH L ⁻¹
S_S - Materia orgánica soluble rápidamente biodegradable	mgCOD L ⁻¹
S_I - Materia orgánica soluble inerte	mgCOD L ⁻¹
X_{ALG} - Microalgas	mgTSS L ⁻¹
X_H - Bacterias heterótrofas	mgTSS L ⁻¹
X_{AOB} - Bacterias oxidantes de amonio	mgTSS L ⁻¹
X_{NOB} - Bacterias oxidantes de nitrito	mgTSS L ⁻¹
X_S - Materia orgánica particulada lentamente biodegradable	mgTSS L ⁻¹
X_I - Materia orgánica particulada inerte	mgTSS L ⁻¹

Las relaciones entre las variables de estado del modelo (representadas en la Tabla 2) y las salidas medidas se describen por las expresiones (1-4).

$$TSS [mgCODL^{-1}] = X_{ALG} + X_H + X_{AOB} + X_{NOB} + X_I + X_S \quad (1)$$

$$TSS [mgTSSL^{-1}] = \frac{X_{ALG}}{1.57} + \frac{(X_H + X_{AOB} + X_{NOB} + X_I + X_S)}{1.45} \quad (2)$$

$$TOC_{(disuelto)} = i_{C,SS} S_S + i_{C,SI} S_I \quad (3)$$

$$IC_{(disuelto)} = CO_2 + HCO_3^- + CO_3^{2-} \quad (4)$$

En (1), el Total de Sólidos en Suspensión está dado por la suma de todos los componentes particulados del modelo. En el modelo BIO_ALGAE 2 las concentraciones de los componentes particulados están expresadas en términos de Demanda Química de Oxígeno (*Chemical Oxygen Demand*, *COD*), por lo cual es necesario realizar la transformación de mgCOD/L a mgTSS/L para realizar la comparación con los datos experimentales. Para realizar este ajuste, se utilizaron las relaciones COD/TSS obtenidas en (Casagli, et al., 2021) representadas en (2). En (3), $i_{C,SS}$ e $i_{C,SI}$ representan la fracción de carbono en la materia orgánica soluble rápidamente biodegradable y la materia orgánica soluble inerte, respectivamente. Los valores de $i_{C,SS}$ e $i_{C,SI}$ utilizados se tomaron de (Reichert, et al., 2001). El carbono inorgánico disuelto (4) comprende la suma en el equilibrio del dióxido de carbono disuelto, el bicarbonato y el carbonato.

4. Estimación de parámetros

Para obtener un buen ajuste del modelo a los datos experimentales, es necesario realizar una estimación de los valores de varios parámetros del modelo. Primeramente, se realiza un

análisis de sensibilidad, para determinar los parámetros que tienen una mayor influencia sobre las salidas del modelo. El análisis de sensibilidad se realizó en EcosimPro® mediante el método de integración IDAS. Este análisis permitió establecer que el modelo tiene una elevada sensibilidad a las velocidades máximas específicas de crecimiento de microalgas (μ_{ALG}) y bacterias heterótrofas (μ_H); a las constantes de inactivación de las microalgas ($k_{death,ALG}$) y bacterias heterótrofas ($k_{death,H}$) y a los parámetros relativos a la transferencia de gases a la atmósfera: oxígeno ($K_{la,O2}$), dióxido de carbono ($K_{la,CO2}$) y amoníaco ($K_{la,NH3}$). Estas variables de decisión coinciden con las calibradas para el ajuste de modelos en otras publicaciones del tema (Solimeno, et al., 2017) (Casagli, et al., 2021).

4.1 Planteamiento del problema de optimización

En este trabajo, el estimador *fair function* se utiliza como función objetivo J para la estimación de parámetros, debido a que esta, a diferencia de los estimadores basados en mínimos cuadrados, es robusta ante errores de medición que no presentan una distribución Gaussiana (Huber, 2014). El problema de optimización dinámica se plantea según:

$$\min_{\hat{\theta}} J(\hat{\theta}, \theta) = \sum_{j \in M} c^2 \left[\frac{|\varepsilon_j|}{c} - \log \left(1 + \frac{|\varepsilon_j|}{c} \right) \right] \quad (5)$$

Sujeto a las restricciones (6) y (7):

$$\frac{dx(t)}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}, t) \quad (6)$$

$$\hat{\mathbf{y}}(t) = \mathbf{g}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}, t) \quad (7)$$

$$\boldsymbol{\theta} \leq \hat{\boldsymbol{\theta}} \leq \bar{\boldsymbol{\theta}}$$

donde $\varepsilon_j = (\hat{\theta}_j - \theta_j)/\sigma$ representa el error entre los datos experimentales (θ) y los estimados por el modelo ($\hat{\theta}$), limitados entre los límites mínimos y máximos definidos, $C \in \mathcal{R}^+$ es un parámetro de ajuste definido por el usuario y σ es la desviación estándar de los datos medidos.

El planteamiento y la forma de resolver un problema de estimación de parámetros en términos de optimización considera que para cada valor del vector de parámetros $\boldsymbol{\theta}$ (variables de decisión) el modelo proporciona una predicción de la respuesta del sistema $\hat{\mathbf{y}}(\boldsymbol{\theta})$ en un experimento determinado. Se toman muestras de los datos de entradas $\mathbf{u}(t)$ y salidas $\mathbf{y}(t)$ del sistema real sobre un período de tiempo $t = 1, \dots, N$. Al modelo se le aplica la misma secuencia de variables manipuladas $\mathbf{u}(t)$ que al sistema. Para cada instante de tiempo t , el error de predicción $\varepsilon_j(t)$ es un indicador de la bondad del modelo. En la Figura 2 se representa el diagrama en bloques del estimador en el procedimiento de optimización secuencial

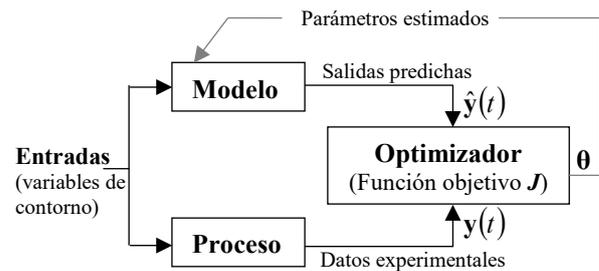


Figura 2. Estimador en la optimización secuencial

En el enfoque secuencial, se utiliza un simulador dinámico para resolver las ecuaciones diferenciales y calcular tanto la función de coste como las restricciones. Luego, un optimizador NLP (*Nonlinear programming*) se encarga de suministrar nuevos valores para las variables de decisión. El simulador recalcula y el ciclo se repite hasta que se alcanza cierto criterio de parada, normalmente que no se consiga mejorar significativamente la función de coste. En este trabajo se ha utilizado el algoritmo de programación no lineal SNOPT en el entorno de simulación dinámica EcosimPro® para resolver el problema de optimización. El método de integración seleccionado ha sido IDAS.

4.2 Estimación de parámetros en el fotobiorreactor

Para la estimación de parámetros se utilizaron los datos experimentales correspondientes a los primeros 30 días de experimentación. En la Tabla 3 se muestran los valores iniciales de los componentes del modelo utilizados para la estimación de parámetros en el fotobiorreactor. Los valores iniciales de los componentes particulados se estimaron a partir del TSS, teniendo en cuenta las relaciones descritas en (Solimeno, et al., 2017). Los valores iniciales de S_I y S_S se estimaron a partir de los valores medidos de TOC disuelto.

Tabla 3: Valores iniciales de los componentes en el fotobiorreactor

Componentes	Valor inicial	Unidades
S_{NH4}	60	mgN-NH ₄ L ⁻¹
S_{NH3}	5	mgN-NH ₃ L ⁻¹
S_{NO3}	0	mgN-NO ₃ L ⁻¹
S_{NO2}	0	mgN-NO ₂ L ⁻¹
S_{CO2}	2	mgC-CO ₂ L ⁻¹
S_{HCO3}	58	mgC-HCO ₃ L ⁻¹
S_{CO3}	1	mgC-CO ₃ L ⁻¹
S_{PO4}	797.9	mgP-PO ₄ L ⁻¹
S_{O2}	19.4	mgO ₂ L ⁻¹
S_H	7.1e-09	mgH L ⁻¹
S_{OH}	1.4e-06	mgH-OH L ⁻¹
S_S	169	mgCOD L ⁻¹
S_I	25.14	mgCOD L ⁻¹
X_{ALG}	1845	mgTSS L ⁻¹
X_H	944	mgTSS L ⁻¹
X_{AOB}	0	mgTSS L ⁻¹
X_{NOB}	1.35	mgTSS L ⁻¹
X_S	81.3	mgTSS L ⁻¹
X_I	222.22	mgTSS L ⁻¹

Para resolver de forma más eficiente el problema de optimización, los coeficientes de transferencia de masa para el dióxido de carbono ($K_{la,CO2}$) y el amoníaco ($K_{la,NH3}$) no se incluyeron como variables de decisión en el problema de optimización. Estos valores se calcularon a partir de su relación con el coeficiente de transferencia de masa para el oxígeno ($K_{la,O2}$) (obtenido mediante optimización), empleando los coeficientes de difusividad (Casagli, et al., 2021).

En la experimentación desarrollada, los primeros 14 días corresponden a la etapa de puesta en marcha de la instalación, por lo cual, en la optimización se ha dado menor peso a estos

datos experimentales. En la función de coste (5), el parámetro de ajuste se ha definido como $C = 2.98$.

En la Tabla 4 se muestran los valores de las variables de decisión obtenidos mediante la estimación de parámetros en el fotobiorreactor. Los límites de las variables de decisión y los valores iniciales para la optimización se establecieron según los valores reportados en la literatura.

Tabla 4: Valores estimados de los parámetros del modelo

Parámetro	Valor estimado
μ_{ALG}	1.5 d ⁻¹
μ_H	1.6 d ⁻¹
$k_{death,ALG}$	0.09 d ⁻¹
$k_{death,H}$	0.9 d ⁻¹
$K_{la,O2}$	25 d ⁻¹

5. Resultados de simulación

A continuación, se presentan los resultados de simulación para la estimación de parámetros y la validación del modelo. En las Figuras 3-7 se muestra el ajuste entre el modelo y los datos experimentales para cada una de las salidas consideradas.

En la Figura 3 se presentan los datos correspondientes al Total de Sólidos en Suspensión. La estimación del TSS en un reactor es de especial importancia, debido a que valores de biomasa alejados del óptimo conllevarían problemas de foto-inhibición o apantallamiento de la luz, con la consiguiente disminución en la oxigenación fotosintética del proceso, que a su vez impacta en los rendimientos de eliminación de materia orgánica y nitrificación.

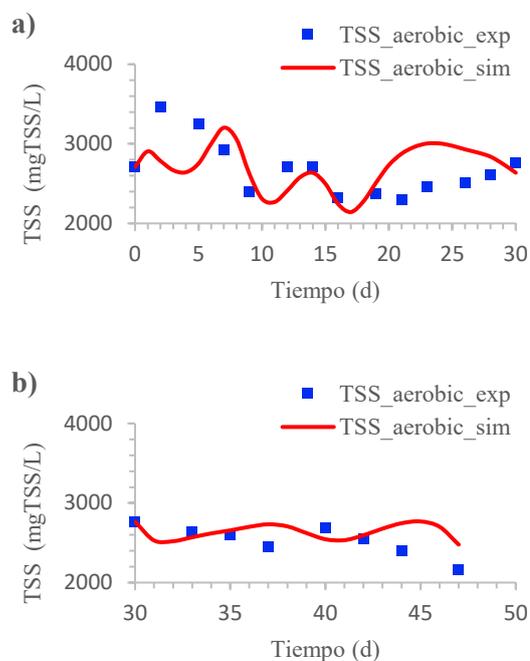


Figura 3: Total de Sólidos en Suspensión (a) Datos usados en estimación de parámetros (b) Datos usados en validación

En las Figuras 4 y 5 se muestran los resultados de simulación para el Carbono Orgánico Total y el Carbono Inorgánico total, respectivamente. La estimación de las concentraciones de ambos componentes es esencial, debido a que representan un indicador de la actividad de las microalgas y bacterias heterótrofas, a la vez que permiten estimar las eficiencias de eliminación de Carbono en el reactor.

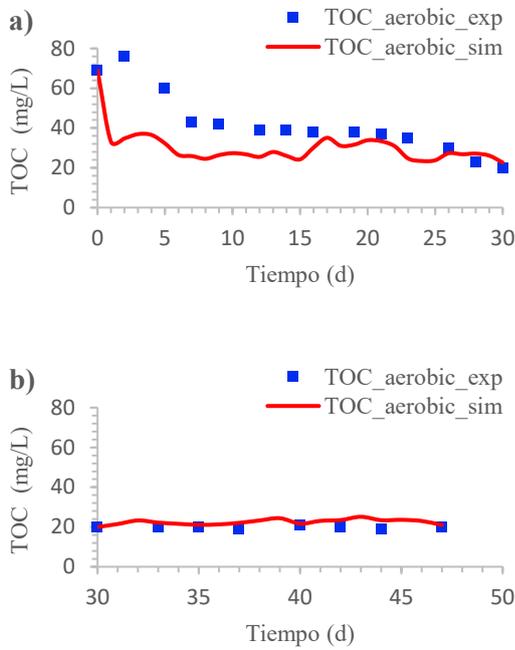


Figura 4: Total Carbono Orgánico Disuelto (a) Datos usados en estimación de parámetros (b) Datos usados en validación

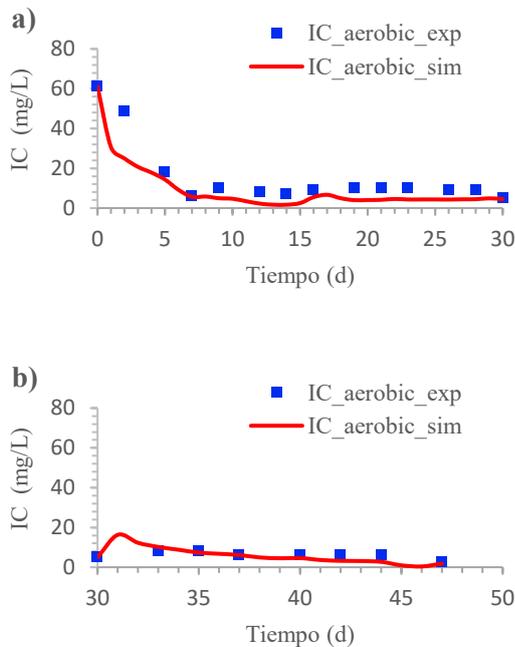


Figura 5: Carbono Inorgánico Disuelto (a) Datos usados en estimación de parámetros (b) Datos usados en validación

La Figura 6 presenta el ajuste entre los datos experimentales y el modelo para el oxígeno disuelto. Esta variable constituye un indicador de la actividad fotosintética en el reactor. En estas condiciones de experimentación, se observan elevadas concentraciones de oxígeno disuelto en el fotobiorreactor.

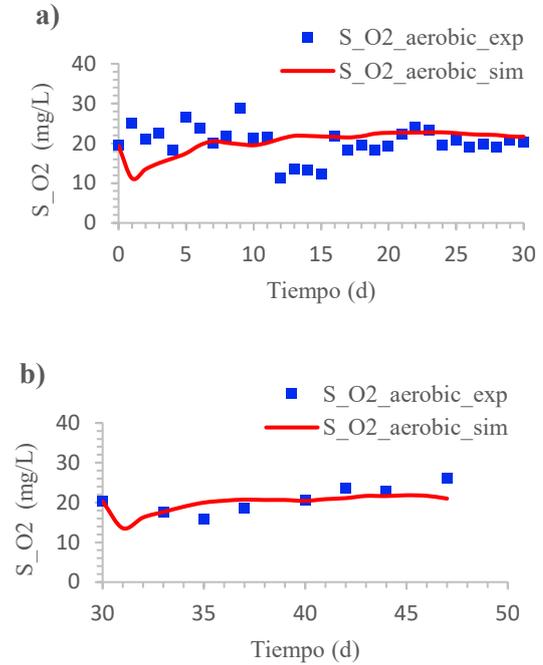


Figura 6: Oxígeno Disuelto (a) Datos usados en estimación de parámetros (b) Datos usados en validación

Por último, en la Figura 7 se muestran las concentraciones de amonio disuelto en el fotobiorreactor. El nitrógeno es un nutriente esencial para el crecimiento de las microalgas y bacterias, por lo cual es importante disponer de un modelo que permita estimar las concentraciones de nitrógeno disuelto en sus diferentes formas. El modelo permite predecir la disminución en la concentración de amonio a estado estacionario, debido a la asimilación del mismo, por lo cual permitiría estimar la eficiencia de eliminación de este nutriente en la instalación.

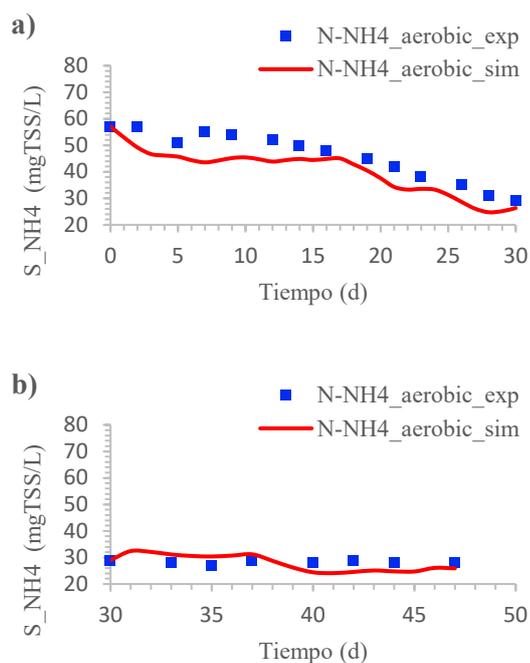


Figura 7: Amonio Disuelto (a) Datos usados en estimación de parámetros (b) Datos usados en validación

6. Conclusiones

En este trabajo, se presenta el modelado y simulación de un fotobiorreactor empleado en una instalación reactor anóxico-reactor aerobio para el tratamiento de aguas residuales domésticas. Se realiza la estimación de parámetros mediante optimización dinámica para ajustar el modelo a los datos experimentales. Mediante simulación, se observa que el modelo reproduce el comportamiento dinámico de las variables medidas.

Como trabajo futuro, se pretende proponer estrategias de control que permitan aumentar la eficiencia de eliminación de nutrientes en instalaciones similares.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por la Junta de Castilla y León y EU-FEDER (CLU 2017-09 y UIC 233) y por la Junta de Castilla y León y el Fondo Social Europeo (Orden EDU/601/2020).

Referencias

- Acien, F., Fernández, J. & Molina, E., 2013. Photobioreactors for the production of microalgae. *Environ. Sci. Biotechnol.*, 12(2), pp. 131-151.
- Alcántara, C. y otros, 2015. Evaluation of wastewater treatment in a novel anoxic-aerobic algal-bacterial photobioreactor with biomass recycling through carbon and nitrogen mass balances. *Bioresource Technology*, Volumen 191, pp. 173-186.
- Arbib, Z. y otros, 2013. Effect of pH control by means of flue gas addition on three different photobioreactors treating urban wastewater in long-term Operation. *Ecol. Eng.*, Volumen 57, pp. 226-235.
- Bausa, I., Muñoz, R., Podar, S. & de Prada, C., 2021. Modelo para la estimación de la concentración de biomasa en una instalación reactor

anóxico-fotobiorreactor aerobio de algas y bacterias para el tratamiento de aguas residuales domésticas. Castellón, 1 a 3 de septiembre, Comité Español de Automática.

Brennan, L. & Owende, P., 2010. Biofuels from microalgae-A review of technologies for production, processing, and extractions of biofuels and co-products. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Volumen 14, pp. 557-577.

Casagli, F. y otros, 2021. ALBA: A comprehensive growth model to optimize algae-bacteria wastewater treatment in raceway ponds. *Water Research*, Volumen 190, p. 116734.

CEE, 1991. Directiva 91/271/CEE SOBRE EL TRATAMIENTO DE LAS AGUAS RESIDUALES URBANAS, s.l.: s.n.

Chae, K. & Kang, J., 2013. Estimating the energy independence of a municipal wastewater treatment plant incorporating green energy resources. *Energy Convers. Manage.*, Volumen 72, pp. 664-672.

Chae, K. & Kang, J., 2013. Estimating the energy independence of a municipal wastewater treatment plant incorporating green energy resources. *Energy Convers. Manage.*, Volumen 72, pp. 664-672.

De Godos, I. y otros, 2014. Assessing carbon and nitrogen removal in a novel anoxic-aerobic cyanobacterial-bacterial photobioreactor configuration with enhanced biomass sedimentation. *Water Res.*, Volumen 61, pp. 77-85.

EEE, 2013. VII Programa General de Acción de la Unión en Materia de Medio Ambiente hasta 2020 «Vivir bien, respetando los límites de nuestro planeta», s.l.: s.n.

Empresarios Agrupados Internacional, 2021. www.ecosimpro.com. [En línea] [Último acceso: 2021].

European Commission, 2000. s.l., ftp.cordis.lu/pub/ist/docs/ka4/report_controlws.pdf.

García, J. y otros, 2006. Long term diurnal variations in contaminant removal in high rate ponds treating urban wastewater. *Bioresour Technol*, Volumen 97, p. 709-1715.

Huber, P., 2014. Robust statistics. En: M. Lovric, ed. *International Encyclopedia of Statistical Science*. s.l.:Springer Berlin, pp. 1248-1251.

Muñoz, R. & Guieysse, B., 2006. Algal-bacterial processes for the treatment of hazardous contaminants: a review. *Water Res.*, Volumen 40, p. 2799-2815.

Reichert, P. y otros, 2001. River water quality model no. 1 (RWQM1): II. Biochemical process equations. *Water Sci Technol : J. Int. Assoc. Water Pollut. Res.*, 43(5), pp. 11-30.

Sánchez-Zurano, A. y otros, 2021. ABACO: A New Model of Microalgae-Bacteria Consortia for Biological Treatment of Wastewaters. *Appl. Sci.*, 11(998).

Solimeno, A. & García, J., 2017. Microalgae-bacteria models evolution: From microalgae steady-state to integrated microalgae-bacteria wastewater treatment models- A comparative review. *Science of the Total Environment*, Volumen 607-608, pp. 1136-1150.

Solimeno, A., Gómez-Serrano, C. & Acien, F., 2019. BIO_ALGAE 2: improved model of microalgae and bacteria consortia for wastewater treatment. *Environmental Science and Pollution Research*, Volumen 26, pp. 25855-25868.

Solimeno, A., Parker, L., Lundquist, T. & García, J., 2017. Integral microalgae-bacteria model (BIO_ALGAE): Application to wastewater high rate algal ponds. *Science of the Total Environment*, Volumen 601-602, pp. 646-657.

Febles R. Arian^a, Alonso A. Lara^a, Feroso D. Jose^b, Verdugo G. Francisco^b, Pérez S. Jorge^c, Mazaeda E. Rogelio^a, Gutiérrez R. Gloria^a

^a Departamento de Ingeniería de Sistemas y Automática. Universidad de Valladolid. C/ Real de Burgos s/n, 47011, Valladolid, España

^b Área de Recursos Naturales y clima. Centro Tecnológico CARTIF, Parque Tecnológico de Boecillo, 47151 Boecillo, Valladolid, España

^c SUGIMAT, C/ Colada d'Arago s/n, 46930 Quart de Poblet, Valencia (España)

Resumen

En los últimos años la producción de energía sostenible mediante la conversión de la biomasa ha cobrado especial interés. Entre las técnicas de conversión termoquímica, procesos como la pirólisis o la gasificación pueden ser interesantes para sustituir o combinar con la combustión directa, la cual genera contaminantes atmosféricos dañinos para el medio ambiente. Sin embargo, estos procesos están aún lejos de ser eficientes ya que la mayoría de los estudios de investigación se han centrado únicamente en la aplicación experimental de los métodos, mientras que la modelización numérica se ha limitado a escala piloto, ignorando las perturbaciones que pueden surgir en el proceso a escala industrial. Estas alternativas de la combustión son procesos muy complejos, pues implican el acoplamiento del equilibrio termoquímico, la cinética, la transferencia de calor y masa, y la dinámica computacional de fluidos. Esta complejidad ha impedido actualmente que los modelos teóricos/computacionales propuestos en la literatura alcancen la precisión necesaria para hacer más eficiente el proceso. En este trabajo ofrecemos un modelo numérico que puede ser implementado en futuras biorrefinerías sostenibles, para mejorar su eficiencia, estableciendo las mejores condiciones de operación. Se modela y simula un sistema flexible de valorización energética de biomasa residuales, considerando su tratamiento y las mejores técnicas disponibles de gestión. Se caracterizan diferentes tipos de biomasa, en cuanto a composición elemental, humedad y poder calorífico con el objetivo de poder comparar resultados y determinar el calor generado en cada caso. Se realiza una evaluación técnico-económica preliminar del sistema de combustión propuesto, considerando cada producto derivado del proceso y disminuyendo en lo posible la generación de contaminantes atmosféricos.

1. Introducción

En la sociedad industrializada, el desarrollo y crecimiento del bienestar de la humanidad en el futuro dependerá de la energía. La tecnología energética en España actualmente sufre una transición en la que se pretende encontrar una producción de energía más sostenible y ecológica.

Actualmente, debido al aumento demográfico existe una mayor demanda de energía, destacando los sectores: residencial, transporte e industrial. Generalmente la energía ha sido producida a partir de combustibles fósiles a pesar de los gases de efecto invernadero y contaminantes atmosféricos que genera. En los últimos años ha habido un incremento notable en la investigación y desarrollo de nuevas tecnologías orientadas a una producción de energía más sostenible y respetuosa con el medio ambiente. En este contexto, se han explorado varias alternativas de producción de energía limpia a partir de fuentes renovables, tales como la energía solar, eólica, hidráulica, mareomotriz, undimotriz, geotérmica, etc. No obstante, el proceso más utilizado continúa siendo la combustión, pese a que es una de las principales fuentes de contaminación por las emisiones de óxidos de nitrógeno, monóxido de carbono y material particulado que genera.

Una solución para mejorar el proceso de combustión desde el punto de vista económico y de reducción de emisiones de gases contaminantes, es modificar el diseño del equipo de caldera convencional y utilizar biomasa residuales como alimentación.

En este artículo, se describe la primera fase de un proyecto que propone un diseño novedoso de una caldera alimentada con biomasa residuales. Se presenta y resuelve el modelo de

la caldera para determinar las condiciones de operación con diferentes tipos de biomasa.

En el apartado 2, se describe la propuesta de diseño de la caldera de combustión objeto de estudio en este trabajo. En el apartado 3 se explican las hipótesis del modelo y en el apartado 4 se presenta el modelo del proceso basado en primeros principios, así como la metodología de cálculo. En el apartado 5 se muestran los resultados obtenidos y finalmente se dan las conclusiones.

2. Descripción de la propuesta de diseño de la caldera

En el marco del proyecto de investigación 0e-MISION (financiado por el programa MISIONES del CDTI y apoyado por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades) en el que participan entre otras entidades, el Centro Tecnológico CARTIF de Valladolid y la Empresa diseñadora de calderas SUGIMAT, se está desarrollando un sistema nuevo de combustión. La caldera está dividida en dos cámaras conectadas en serie, como se muestra en la **Figura 1**, donde la alimentación es biomasa residual.

Al entrar en la primera cámara (C_1), la biomasa pasa por un proceso de pretratamiento donde se seca y sufre varias transformaciones físicas y químicas. En esta cámara se trabaja a baja temperatura y en condiciones cercanas a la pirólisis: con un nivel de oxígeno controlado y temperatura inferior a 600°C, para separar todos los sólidos e impedir que pasen a la segunda cámara en forma de partículas inquemadas. Como producto del proceso de pirólisis, se obtienen, un resto sólido que se denominará biochar y unos volátiles.

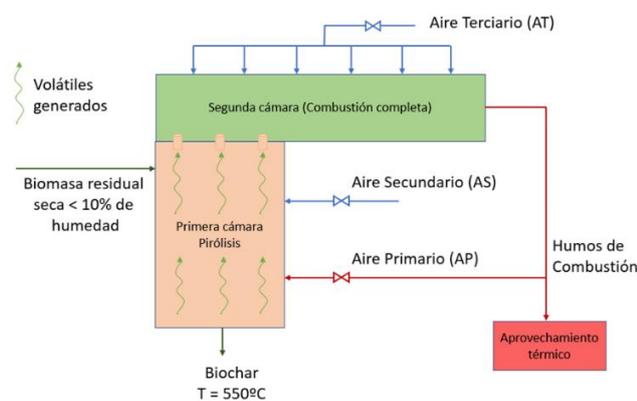


Figura 1. Esquema global del proceso

En esta etapa es importante controlar la cantidad de aire que se introduce a la cámara o que está en contacto con el combustible, ya que se desea una combustión incompleta y además el aire se utiliza como variable de control para regular el agotamiento del **resto carbonoso (Biochar)** que se extrae del equipo.

Para llevar a cabo la combustión parcial de la biomasa, el equipo dispone de suministros de aire en tres zonas diferenciadas. Desde la parte inferior a la superior de la cámara, se introducen los **gases de escape o humos de combustión** que son recirculados al lecho del combustible desde la salida de la caldera. Esta corriente se considera como aire primario (AP), con baja concentración de oxígeno de forma tal que el proceso se comporte como un proceso de pirólisis que es lo que se persigue en esta primera zona del equipo.

Seguidamente, el aire secundario (AS), entra por la parte superior de la C_1 delimitando inferiormente la segunda cámara (C_2), cámara de combustión. La corriente AS es precalentada en un economizador para mejorar el rendimiento del proceso. Este flujo de aire tiene una mayor composición de oxígeno (21% vol), por tanto, solo se usará en caso de que se quiera alcanzar mayor conversión del combustible en esta etapa, esto también garantiza la flexibilidad de la operación.

Por último, se introduce en la C_2 una tercera corriente de aire terciario (AT) mediante un ventilador, a través del cual se manipula el flujo para conseguir mezcla homogénea. En la C_2 se lleva a cabo la combustión completa de los gases extraídos de la C_1 con el objetivo de alcanzar el 100% de conversión de combustible y asegurar que los humos de combustión tengan la composición apropiada y que el rendimiento de operación sea alto.

Los humos de combustión que abandonan la C_2 se utilizan en varias alternativas de aprovechamiento térmico, tales como uso en caldera de vapor, en economizador, entre otros.

3. Hipótesis del modelo

Las biomásas residuales se definen como la materia orgánica que generalmente procede de plantas, animales y/o sólidos urbanos. Sus componentes principales son el carbono (C), hidrógeno (H), nitrógeno (N) y oxígeno (O); aunque también contienen una pequeña parte de azufre (S), cloro (Cl), y otros elementos como ciertos metales.

Entre las ventajas que se buscan con este diseño, de cara a reducir las emisiones atmosféricas, es que todos los metales pesados de la biomasa se pueden extraer de la C_1 como parte del resto carbonoso, evitándose así, su emisión con los volátiles hacia la segunda etapa.

En este trabajo, se considera que no hay gases condensados en el paso intermedio entre ambas cámaras, debido a que no existen puntos fríos en el sistema y no transcurre el tiempo necesario para que se generen. **Además, se asume que los reactivos permanecen el tiempo suficiente en el interior del equipo para que todas las reacciones químicas alcancen el estado de equilibrio.**

En cuanto al modo de operación del reactor, en ambas cámaras se asume un patrón de flujo de mezcla perfecta, por lo que hay mezcla homogénea de todos los componentes dentro del equipo. Cuando se alcanza el estado estacionario, este tipo de reactor trabaja de manera continua, manteniendo siempre constante el flujo de entrada de reactivos y salida de productos.

Se supone que la materia entrante es mezclada de manera instantánea y se homogeniza dentro del reactor, con lo cual se produce una concentración en el interior del reactor igual a la concentración de salida. Lo mismo sucede con la temperatura y otras propiedades intensivas de la mezcla.

Por otro lado, se asume que el azufre inorgánico que reacciona vuelve a su estado inicial cuando entra en contacto con la propia biomasa fresca, es decir se reduce de SO_x a azufre [16].

Uno de los conceptos de mayor interés en la valorización energética de biomásas residuales es el proceso de combustión. Se han realizado varios intentos de construir modelos informáticos para diferentes reactores de combustión [1], con el fin de reducir la dependencia de los enfoques experimentales y tener un resultado factible tanto económico como ambiental.

Entre los reactores de biorrefinería más estudiados que inciden en la conversión termoquímica, se encuentran el gasificador de corriente ascendente (*updraft*) [2]–[4] y el de corriente descendente (*downdraft*) [5]–[8]. También están los gasificadores de *cross-draft* [9], lecho fluidizado [10], [11] y el gasificador de flujo arrastrado [12] que se dividen en tres categorías principales: (1) lecho móvil (fijo), y (2) lecho fluidizado y (3) gasificador de flujo arrastrado [13]. Mazaheri y otros autores [1] analizaron los gasificadores de lecho móvil y de lecho fluidizado, donde se proporciona una metodología para desarrollar modelos teóricos y computacionales apropiados para el proceso de gasificación.

También existen modelos complejos que integran múltiples conceptos termodinámicos y de reacciones químicas. Uno de ellos es, el mecanismo conocido como *GRI-Mech 3.0* [14] el cual puede ser implementado en Cantera [15].

GRI-Mech 3.0 es un mecanismo diseñado para modelar la combustión del gas natural, incluyendo la formación de óxidos de nitrógeno (NO). Proporciona una cinética básica sólida que permite predecir las propiedades básicas de la combustión. Este mecanismo contiene 325 reacciones químicas elementales, expresiones cinéticas y parámetros termoquímicos asociados para 53 especies (incluyendo el argón). Mientras que Cantera es un conjunto de herramientas de código abierto, que permite resolver problemas relacionados con la cinética, química, la termodinámica y los procesos de transporte. Teniendo en cuenta la potencialidad y capacidad de cálculo que aportan estas técnicas, en este trabajo se utilizan como complemento en la solución del modelo.

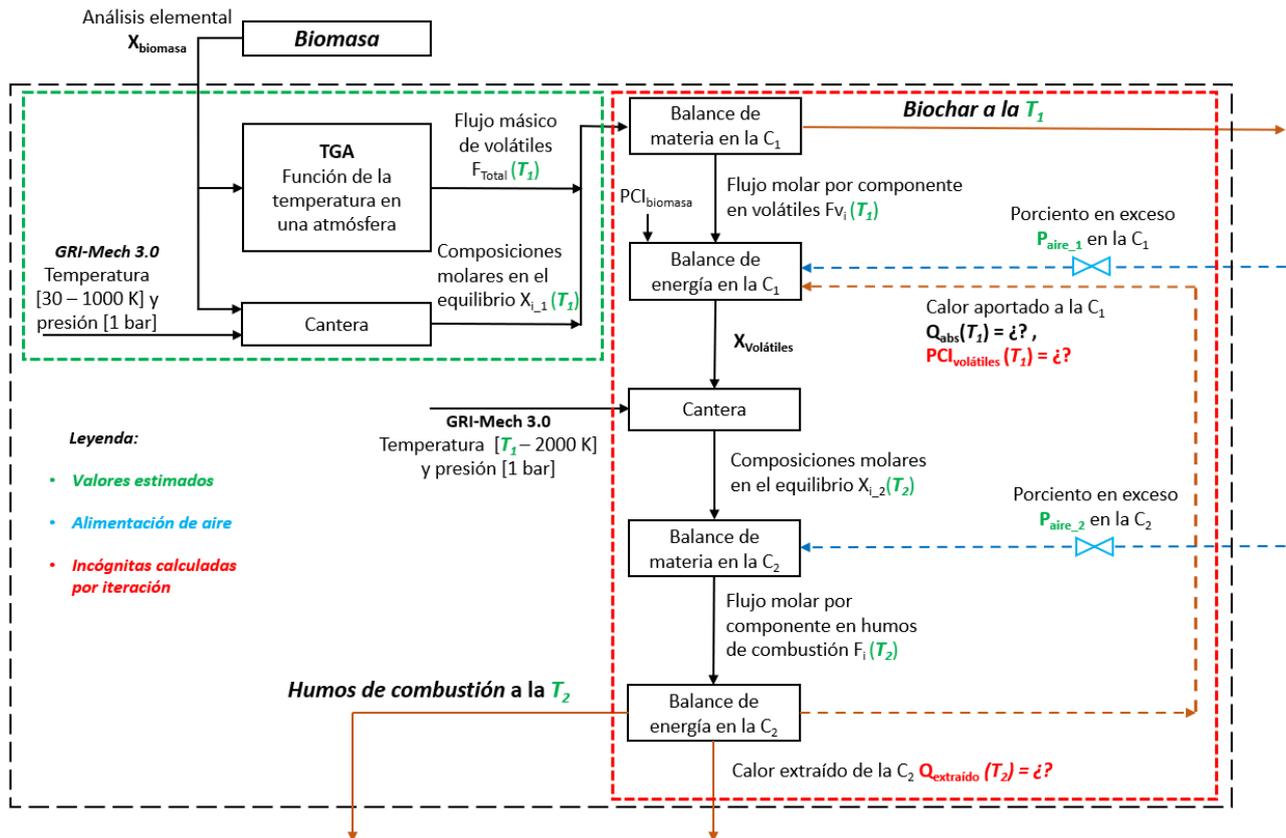


Figura 2. Diagrama de bloque representativo de la solución del problema

4. Modelo y Metodología de cálculo

El modelo se basa en ecuaciones fisicoquímicas que describen el proceso de valorización energética de residuos sólidos.

4.1 Caracterización de la alimentación a la caldera

Antes de resolver el modelo del proceso, es necesario hacer una caracterización elemental (en composición másica, humedad y cenizas) y energética (poder calorífico inferior, PCI) de diferentes biomásas, para determinar el flujo másico de los volátiles y las composiciones molares en el equilibrio. Este procedimiento se ilustra en el cuadro de líneas discontinuas verde en la parte izquierda de la **Figura 2**. De la variedad de biomásas de alimentación de calderas disponibles en el mercado, en este trabajo se han estudiado biomasa de tipo lodo de la estación depuradora de aguas residuales (EDAR) con un alto contenido en humedad, un hidrochar de fracción orgánica de los residuos sólidos urbanos (FORSU) en pellet y un hidrochar de restos de poda en pellet.

Las propiedades físicas y químicas de cada combustible en función de la temperatura a una atmósfera controlada, se determinan mediante un análisis termogravimétrico (TGA), donde se obtiene la velocidad de pérdida de peso del combustible, y por ende el flujo de volátiles liberados $F_{Total}(T_1)$. En las **Figura 5** y **Figura 6** se muestran los perfiles de composiciones, $X_{i_1}(T_1)$, en el equilibrio en función de la temperatura, que se calculan con *Mech-GRI 3.0* en Cantera.

Una vez caracterizada la biomasa de alimentación, se pueden calcular los balances de materia y de energía teniendo en cuenta las reacciones químicas más representativas, como se

ilustra en la parte derecha de la figura 2, remarcado en líneas discontinuas en rojo.

4.2 Balance de materia

La cantidad de cada componente, $X_{i_1}(T_1)$, presentes en la pirólisis posibilita conocer el flujo de cada componente en los volátiles que se transfieren a la C_2 , este cálculo se realiza mediante la ecuación de balance de materia, ecuación (1).

$$F_{V_i}(T_1) = X_{i_1}(T_1) \cdot F_{Total}(T_1) \quad (1)$$

Donde i es el componente representativo en la mezcla gaseosa de productos y T_1 es la temperatura de operación de la C_1 , que se puede variar dependiendo de los requerimientos de operación. Estos balances fueron realizados para varios combustibles con el objetivo de definir los componentes más representativos de la mezcla y así simplificar el modelo complejo *GRI-Mech 3.0*. Las variables de flujo de volátiles se calcularon en un rango amplio de temperatura entre 30°C y 1000°C , para estudiar la sensibilidad y obtener la temperatura óptima en función del grado de agotamiento deseado de la biomasa.

4.3. Balance de energía

El proceso en la C_1 es endotérmico, sin embargo, la combustión de algunos de los componentes de los volátiles como el metano (CH_4) y el monóxido de carbono (CO), puede utilizarse como calor de aporte al proceso. En este caso, se espera que el proceso demande calor porque las biomásas residuales utilizadas tienen alto contenido de cenizas y en ocasiones, elevada humedad. Para conocer los requerimientos térmicos de esta etapa y el PCI de los volátiles se plantea la

ecuación general del balance de energía para la C_1 , la cual cuenta con cuatro términos:

- Calor aportado por la biomasa.
- Calor suministrado proveniente de la C_2 para calentar la biomasa.
- Poder calorífico del flujo de volátiles producto de las reacciones de pirólisis.
- Corriente de residuales sólidos (biochar + cenizas).

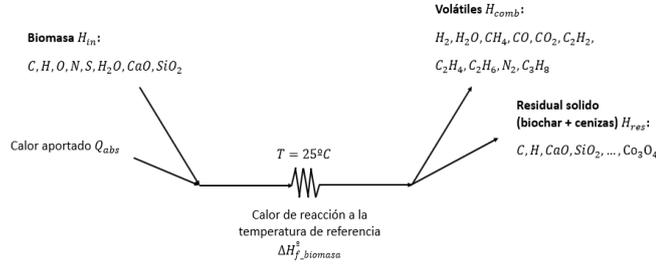


Figura 3. Camino termodinámico (Pirólisis C_1)

En la **Figura 3** se muestra el camino termodinámico para el desarrollo del balance. Se supone que las reacciones se llevan a cabo en un reactor (sistema cerrado) sin producción de trabajo ni pérdidas de calor debido a problemas de aislamiento térmico. Se consideran despreciables las variaciones de las energía cinética y potencial.

La ecuación (2) describe la expresión simplificada del balance global de energía en estado estacionario. Mientras que en la ecuación (3) se desglosa cada uno de los calores intercambiados en el sistema.

$$\Delta H = Q = 0 \quad (2)$$

$$Q_{abs} + H_{in} + H_{comb} + \Delta H_{f_biomasa}^0 + H_{res} = 0 \quad (3)$$

Donde:

- Q_{abs} : Calor absorbido por la biomasa o calor aportado a la C_1 [kW].
- H_{comb} : Entalpía específica de los volátiles liberados [kW].
- $\Delta H_{f_biomasa}^0$: Entalpía de reacción a la temperatura de referencia 25°C [kW].
- H_{in} : Entalpía de la biomasa en la alimentación [kW].
- H_{res} : Entalpía específica del residual sólido que sale de la C_1 [kW].

La entalpía de la reacción ($\Delta H_{f_biomasa}^0$) se calcula con la entalpía de formación a 25°C de los componentes de las reacciones químicas más representativas en esta etapa (C_1).

- $H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$
- $2C + 3H_2 \rightarrow C_2H_6$
- $3C + 4H_2 \rightarrow C_3H_8$
- $C + 2H_2 \rightarrow CH_4$
- $C + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO$
- $2C + 2H_2 \rightarrow C_2H_4$
- $2C + H_2 \rightarrow C_2H_2$

El calor absorbido Q_{abs} se calcula a partir de la temperatura establecida en la C_1 , el flujo de biomasa alimentada y su composición; mientras que la H_{in} es determinada a través del poder calorífico inferior de la biomasa.

Por otro lado, la H_{res} se calcula a partir la composición del biochar y su temperatura, es decir la misma temperatura de

operación de la C_1 . La composición del biochar se obtiene previamente del balance de materia por componente.

En el caso de H_{comb} se requiere un mayor número de cálculos ya que se debe tener en cuenta el poder calorífico inferior de los volátiles. El $PCI_{volátiles}$ fue calculado iterativamente estableciendo una temperatura hipotética de los humos de combustión. Ha sido demostrado en los estudios realizados posteriormente que esta suposición no influye en el valor del $PCI_{volátiles}$, a diferencia de su composición.

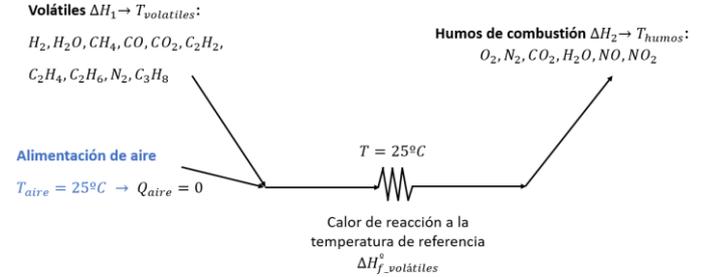


Figura 4. Camino termodinámico (Combustión completa C_2)

La ecuación (4) corresponde al balance de energía que se presenta en la **Figura 4**.

$$\Delta H_1 + \Delta H_{f_volátiles}^0 + \Delta H_2 = 0 \quad (4)$$

$$H_{comb} = \Delta H_1 + \Delta H_{f_volátiles}^0 = \Delta H_2 \quad (5)$$

$$PCI_{volátiles} = \frac{H_{comb}}{m_{volátiles}} \quad (6)$$

Donde:

- ΔH_1 : Entalpía de los volátiles a la salida de la C_1 [kW].
- $\Delta H_{f_volátiles}^0$: Entalpía de reacción de los volátiles a 25°C [kW].
- ΔH_2 : Entalpía de los humos de combustión a la salida de la C_2 .
- $m_{volátiles}$: Flujo másico de volátiles alimentados a la C_2 [kg/h].

Para calcular la $\Delta H_{f_volátiles}^0$, se identifican las reacciones representativas del modelo, típicas en reacciones de combustión completa las que se muestran a continuación:

- $CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$
- $C_2H_6 + \frac{7}{2}O_2 \rightarrow 2CO_2 + 3H_2O$
- $C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$
- $C_2H_4 + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O$
- $H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$
- $CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$
- $\frac{1}{2}N_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow NO$
- $NO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow NO_2$
- $C_2H_2 + \frac{5}{2}O_2 \rightarrow 2CO_2 + H_2O$

Con el objetivo de validar una parte del modelo, la formación de óxidos de nitrógeno NO_x fue recalculada mediante las expresiones de equilibrio químico en función de la temperatura $K_p(T)$. Se ha utilizado la estequiometría de dos de las reacciones químicas anteriores, específicamente en las que interviene el nitrógeno.

5. Resultados

El modelo representa la condición de equilibrio, es decir, los resultados son obtenidos en el estado donde la velocidad de las reacciones en ambas direcciones se iguala.

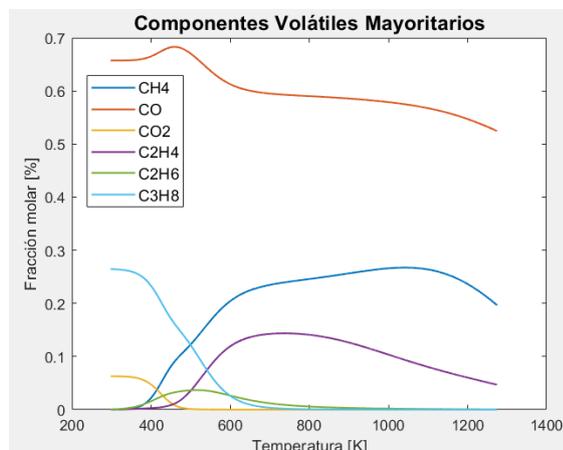


Figura 5. Fracciones molares de los volátiles mayoritarios en función de la Temperatura.

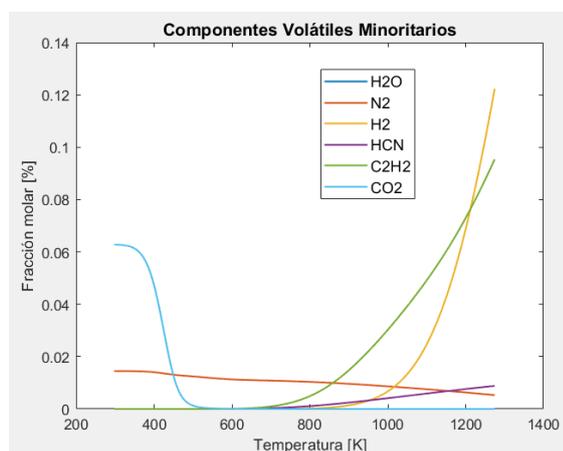


Figura 6. Fracciones molares de los volátiles minoritarios en función de la temperatura.

Los componentes significativos han sido seleccionados teniendo en cuenta la magnitud de su fracción molar en la mezcla. En la **Figura 5** y **Figura 6** pueden verse los perfiles de las composiciones para el caso del polvo de poda. En el análisis realizado posteriormente para el resto de los combustibles, se evidenció que los componentes significativos coinciden, en cambio el perfil de estos es diferente. El componente mayoritario que se produce a cualquier temperatura es el CO. Los otros compuestos que se generan dependen de la temperatura en el proceso.

La biomasa principalmente es un polisacárido o polialcohol, normalmente llena de grupos -OH y es de esperar una hidrogenación de estos grupos -OH para formar H_2O , además, la energía libre de Gibbs de formación del H_2O es muy favorable. No obstante, en el caso del polvo de poda los niveles de H_2O en los volátiles son bajos por la condición de equilibrio que se alcanza en el sistema y por la baja humedad que presenta (6.4%) como puede verse en la **Tabla 1**.

Tabla 1. Análisis elemental y energético de biomásas estudiadas.

	Lodo de EDAR	Hidrochar FORSU pellet	Hidrochar poda pellet
Humedad total [%]	83,00	4,10	6,40
Cenizas [%]	35,5	16,30	15,70
Carbono [%]	31,70	56,70	52,50
Hidrógeno [%]	5,30	6,80	5,40
Nitrógeno [%]	5,68	2,41	1,17
Azufre [%]	1,06	0,19	0,18
Cloro [%]	0,12	0,11	0,05
Oxígeno [%]	20,60	17,40	25,00
Total [% m/m b.s.]	99,96	99,90	99,99
PCI_p [MJ/kg]	0,28	23,10	19,33

En cambio, en el lodo de EDAR al tener un elevado contenido de humedad (83%) es un combustible del que se puede extraer poca energía ya que la mayor parte del calor que pueda aportar se consume en evaporar el agua que contiene (PCI bajo), siendo un caso extremo de biomasa ya que en la realidad no se realiza la combustión de ella al poder producir una cantidad de energía insignificante. En la **Tabla 2**, se observa una composición elevada de agua en los volátiles para esta biomasa.

Tabla 2. Composición de los volátiles producidos en la pirólisis para tres biomásas diferentes.

	BIOMASAS RESIDUOS		
	Lodo de EDAR	Hidrochar FORSU pellet	Hidrochar poda pellet
Alimentación [Kg/h]	57	35	31
Componentes representativos	Concentración volumétrica de los volátiles producto de la pirólisis		
H_2	19,50%	0,01%	0,03%
H_2O	71,76%	0,00	1,06E ⁻⁰⁷ %
CH_4	0,07%	12,46%	24,82%
CO	0,56%	40,12%	58,92%
CO_2	7,48%	5,71E ⁻⁰⁵ %	0,00%
C_2H_2	2,60E ⁻¹⁴ %	5,98%	0,66%
C_2H_4	3,19E ⁻¹⁰ %	38,06%	13,86%
C_2H_6	6,72E ⁻⁰⁹ %	0,42%	0,50%
HCN	2,12E ⁻⁰⁸ %	0,62%	0,14%
N_2	0,62%	2,29%	1,02%
C_3H_8	2,97E ⁻¹⁵ %	0,06%	0,05%
Total	100%	100%	100%
Q_{abs} [kW]	39,28	5,73	5,27
Q_{ext} [kW]	49,59	116,14	72,49

Se hicieron varios experimentos en la simulación modificando las condiciones en el proceso con distintas biomásas para determinar el rango óptimo de trabajo, siendo el tipo de alimentación a la caldera, uno de los factores fundamentales en el comportamiento del sistema. Por ejemplo, en la **Tabla 2** se muestran los resultados obtenidos para la pirólisis a 550°C trabajando solo con aire primario y realizando la combustión a 900°C con un 5% de aire en exceso. Los valores en rojo de la tabla indican que, el combustible que mayor energía aporta es el Hidrochar FORSU pellet con 116,14kW.

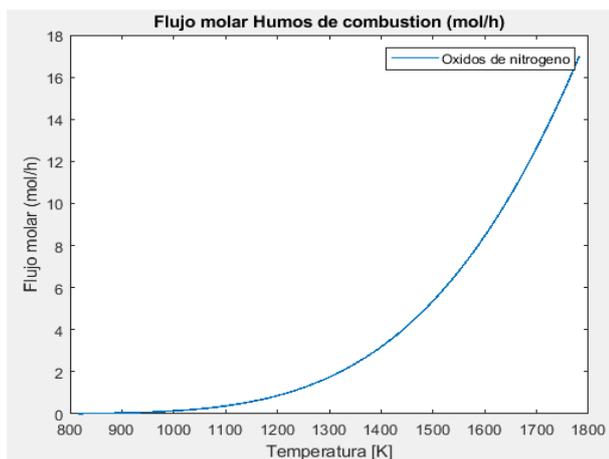


Figura 7. Flujo molar de óxidos de nitrógeno (NO_x) en humos de combustión

Por otra parte, en la **Figura 7** se observa que a partir de 1300K la generación de NO_x se incrementa considerablemente.

Los resultados obtenidos muestran que el rango de temperatura en el que se debe operar el proceso de pirólisis es de 600 a 850K y en el proceso de combustión entre 1050 y 1373K.

6. Conclusiones

En el presente trabajo se desarrolló el modelo de bi-equilibrio para predecir la composición del gas de síntesis, la energía producida y el caudal para la gasificación de la biomasa en un reactor de corriente ascendente **Figura 1** en dos cámaras. Mediante la simulación y el análisis lógico se establecen las condiciones de operación de las variables críticas del sistema de valorización energética de dichas biomásas y la minimización de contaminantes atmosféricos.

Además, se discute la importancia del tipo de materia prima usada, concentrándose en tres biomásas principales: lodo de EDAR, hidrochar de FORSU en pellet e hidrochar de restos de poda en pellet.

Finalmente, este modelo de bi-equilibrio se utilizará como herramienta de predicción para el análisis del proceso y la optimización de la planta, así como para la programación de las futuras campañas experimentales en empresas generadoras de residuos. Los resultados obtenidos reflejaron la viabilidad del sistema, por tanto, el proyecto puede pasar a una siguiente etapa donde se realice una evaluación más profunda, entrando así en la ingeniería de detalle.

A diferencia de la C_2 , este modo de operación es difícil de conseguir en la pirólisis en la C_1 . Son procesos más lentos y dependientes de la temperatura. Por esta razón, se debe valorar en estudios futuros dividir la C_1 en tantas secciones como sea posible, para así mejorar el modelo de forma que refleje

de un modo más realista lo que sucede en la etapa de pirólisis. Por ejemplo, la C_1 se puede dividir en secciones donde cada una se considere como un volumen de mezcla completa y en condiciones diferentes de temperatura y conversión.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo proporcionado por la Universidad de Valladolid y el Centro Tecnológico CARTIF para llevar a cabo la investigación.

Referencias

- [1] N. Mazaheri, A. H. Akbarzadeh, E. Madadian, y M. Lefsrud, «Systematic review of research guidelines for numerical simulation of biomass gasification for bioenergy production», *Energy Convers. Manag.*, vol. 183, n.º October 2018, pp. 671-688, 2019, doi: 10.1016/j.enconman.2018.12.097.
- [2] B. de Mena, D. Vera, F. Jurado, y M. Ortega, «Updraft gasifier and ORC system for high ash content biomass: A modelling and simulation study», *Fuel Process. Technol.*, vol. 156, pp. 394-406, 2017, doi: 10.1016/j.fuproc.2016.09.031.
- [3] T. M. Ismail y M. A. El-Salam, «Parametric studies on biomass gasification process on updraft gasifier high temperature air gasification», *Appl. Therm. Eng.*, vol. 112, pp. 1460-1473, feb. 2017, doi: 10.1016/J.APPLTHERMALENG.2016.10.026.
- [4] F. Salem y S. Kalloum, «Realization and testing of an updraft gasifier preliminary study», *Int. J. Mech. Eng. Robot. Res.*, vol. 6, n.º 2, pp. 114-117, 2017, doi: 10.18178/IJMERR.6.2.114-117.
- [5] D. Baruah, D. C. Baruah, y M. K. Hazarika, «Artificial neural network based modeling of biomass gasification in fixed bed downdraft gasifiers», *Biomass and Bioenergy*, vol. 98, pp. 264-271, 2017, doi: 10.1016/j.biombioe.2017.01.029.
- [6] B. Ibrahimoglu, A. Cucen, y M. Z. Yilmazoglu, «Numerical modeling of a downdraft plasma gasification reactor», *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 42, n.º 4, pp. 2583-2591, 2017, doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.06.224.
- [7] A. A. P. Susastriawan, H. Saptoadi, y Purnomo, «Small-scale downdraft gasifiers for biomass gasification: A review», *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 76, pp. 989-1003, sep. 2017, doi: 10.1016/J.RSER.2017.03.112.
- [8] W. Zhang *et al.*, «Simulation on co-gasification of bituminous coal and industrial sludge in a downdraft fixed bed gasifier coupling with sensible heat recovery, and potential application in sludge-to-energy», *Energy*, vol. 243, p. 123052, 2022, doi: 10.1016/j.energy.2021.123052.
- [9] A. Saravanakumar, T. M. Haridasan, y T. B. Reed, «Flaming pyrolysis model of the fixed bed cross draft long-stick wood gasifier», *Fuel Process. Technol.*, vol. 91, n.º 6, pp. 669-675, jun. 2010, doi: 10.1016/J.FUPROC.2010.01.016.
- [10] Chen Shaolong; Wang Jinfeng, «A multilayer compound seal pad for on vehicle air conditioner HVAC assembly», 2019.
- [11] D. S. Pandey, I. Pan, S. Das, J. J. Leahy, y W. Kwapinski, «Multi-gene genetic programming based predictive models for municipal solid waste gasification in a fluidized bed gasifier», *Bioresour. Technol.*, vol. 179, pp. 524-533, mar. 2015, doi: 10.1016/J.BIORTECH.2014.12.048.
- [12] C. O. Kim, R. G. Kim, Z. Wu, y C. H. Jeon, «Dynamic modeling and simulation of reaction, slag behavior, and heat transfer to water-cooling wall of shell entrained-flow gasifier», *Korean J. Chem. Eng. 2016 336*, vol. 33, n.º 6, pp. 1767-1776, abr. 2016, doi: 10.1007/S11814-016-0074-X.
- [13] J. Phillips, «Different types of gasifiers and their integration with gas turbines», en *Gasifipedia*, US Dept of Energy National Energy Technology Laboratory, 2006.
- [14] G. P. Smith *et al.*, «GRI-Mech 3.0», 2022. <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html> (accedido feb. 18, 2022).
- [15] Nikola, «Cantera», 2022. <https://cantera.org/> (accedido feb. 08, 2022).
- [16] T. Lang, A. D. Jensen, y P. A. Jensen, «Retention of organic elements during solid fuel pyrolysis with emphasis on the peculiar behavior of nitrogen», *Energy and Fuels*, vol. 19, n.º 4, pp. 1631-1643, 2005, doi: 10.1021/ef049739a.

Resumen

La capacidad que poseen las bacterias para adaptarse a su entorno y desarrollar resistencia a los compuestos antimicrobianos actualmente conocidos (antibióticos, desinfectantes y conservantes) plantea un serio problema, económico y de salud pública, el cual se agrava a pasos agigantados. Tan sólo en el año 2019, informes oficiales de las Naciones Unidas cifran en 700 000 los fallecimientos que se pueden atribuir directamente a la infección provocada por algún tipo de bacteria resistente a los antibióticos. Por desgracia, algunos estudios recientes sugieren que estos datos pueden resultar incluso más desalentadores, rondando los 1.27 millones de fallecidos en este mismo año (Murray et al., 2022). El rápido desarrollo de resistencia a antimicrobianos que presentan algunas bacterias afecta ya, de manera particularmente negativa, a las industrias médica y alimentaria, entre muchas otras. Este problema, lejos de tener solución, parece avanzar mucho más rápidamente que nuestra capacidad para entender las causas e implicaciones, del mismo. Por lo tanto, se hace cada vez más necesario ampliar nuestro conocimiento sobre los mecanismos que conducen al origen, selección y transmisión de resistencia a antimicrobianos en poblaciones bacterianas, con el fin de diseñar terapias de desinfección eficaces para atajar este indeseable fenómeno.

El objetivo principal de la tesis doctoral que se plantea consiste en el estudio, análisis y desarrollo de modelos mecanísticos de resistencia a antimicrobianos. Se tratará de trabajar siempre con modelos *operacionales*, de forma que su resolución y simulación debe resultar suficientemente eficiente como para ser integrados en esquemas prácticos de optimización, los cuales se emplearán en el diseño de protocolos óptimos de desinfección. En particular, se tratará de desarrollar una metodología de modelado que permita explicar el origen, selección y transmisión de resistencia a antimicrobianos dentro de poblaciones bacterianas, intentando mantener un compromiso óptimo entre precisión y eficiencia. Los modelos basados en población (*macro-escala*) suelen presentar un planteamiento relativamente sencillo, pero resultan insuficientes para describir adecuadamente las dinámicas implicadas en el origen, selección y transmisión de resistencia, procesos aleatorios por naturaleza (Merdan et al., 2017). Por otro lado, los modelos basados en individuos (*micro-escala*) describen propiedades únicas para cada bacteria que conforma la población, por lo que generalmente poseen una estructura demasiado compleja para implementar metodologías de resolución y análisis de manera eficiente, exceptuando el caso de poblaciones formadas por un número reducido de individuos. Alternativamente, el modelado *meso-escala* (Martínez-López et al., 2021; García et al., 2018) trata de posicionarse en un rango de operación situado a medio camino entre la *micro-escala* y la *macro-escala* (ver Figura 1), describiendo la población bacteriana como un conjunto de sus propiedades medias sin renunciar completamente a las singularidades que presentan las bacterias entre sí. El enfoque *meso-escala*, que se abordará en esta tesis, permite estudiar el interesante problema de la combinación de los efectos de las distintas escalas beneficiándose, por lo tanto, de las principales ventajas del modelado *micro-escala* y *macro-escala*. Además, también se estudiarán y compararán diferentes técnicas numéricas de aplicación a la resolución de las ecuaciones diferenciales ordinarias, estocásticas Kloeden and Platen (1992), o en derivadas parciales (Vande Wouwer et al., 2014), que puedan estar implicadas en los modelos que se estudien.

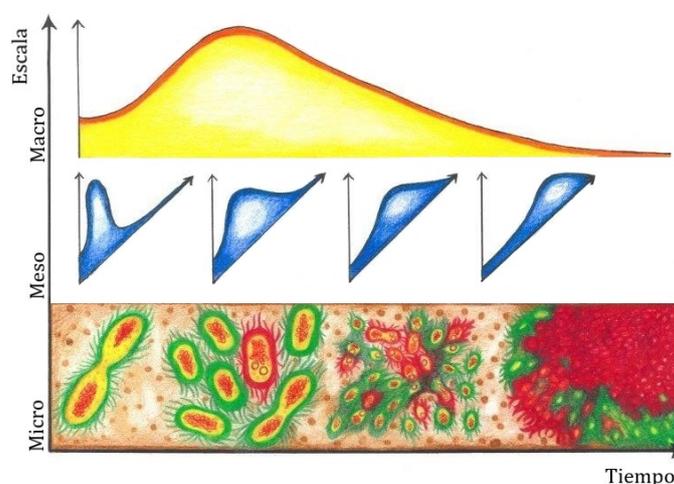


Figura 1. Representación de las tres escalas de modelado que se estudiarán para explicar el problema de la resistencia bacteriana a antimicrobianos.

*Autor para la correspondencia: nmartinez@iim.csic.es

Un problema particularmente atractivo en este contexto consiste en el modelado de los mecanismos que dan lugar al origen, selección y transmisión de resistencia a antimicrobianos en biopelículas. Estas agregaciones de bacterias pueden resistir de manera más eficiente los protocolos de desinfección, como resultado directo de su agrupación (Ranjbaran et al., 2021). La caracterización matemática de la resistencia a antimicrobianos en biopelículas abarca las diferentes escalas de modelado que se acaban de describir (Klapper and Dockery, 2010), planteando un problema idóneo para aplicar de manera conjunta la totalidad de las técnicas estudiadas en el transcurso de la tesis.

Finalmente, se intentará validar de forma experimental los distintos modelos desarrollados durante la tesis, así como los resultados que se vayan obteniendo de los procesos de optimización ejecutados sobre dichos modelos. Para ello, se procurará emplear datos obtenidos principalmente mediante dos técnicas experimentales: la citometría de flujo (McKinnon, 2018) y el morbidostato (Pedreira et al., 2021). La citometría de flujo es una técnica diseñada para medir las propiedades físicas y químicas de poblaciones celulares que puede ser utilizada para obtener datos estadísticos, como la distribución del volumen celular, que ayudan a caracterizar las poblaciones bacterianas. Esta técnica proporcionaría la base experimental para el modelado *meso-escala*. Por otro lado, el morbidostato es un dispositivo de cultivo bacteriano que permite medir propiedades de crecimiento, monitorizar poblaciones y estudiar la regulación dinámica de los protocolos de desinfección basados en el uso de antimicrobianos. El objetivo sería utilizar los datos obtenidos para dotar a los modelos de capacidades predictivas, aplicando los distintos pasos del ciclo de identificación de modelos (Vilas et al., 2018), a saber, el análisis de identificabilidad estructural y práctica, la estimación de parámetros, así como el diseño óptimo de experimentos y la validación final del modelo.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido realizado gracias al apoyo de la Agencia Nacional (RTI2018-093560-J-I00 (MCIU/AEI/FEDER, UE), RYC2019-028006-I/AIE/10.13039/501100011033) y a la 20213AT00 Atracción de Talento para RYC2019 del CSIC.

Referencias

- García, M.R., Vázquez, J.A., Teixeira, I.G., Alonso, A.A., 2018. Stochastic individual-based modeling of bacterial growth and division using flow cytometry. *Front. Microbiol.* 8. doi:10.3389/fmicb.2017.02626.
- Klapper, I., Dockery, J., 2010. Mathematical description of microbial biofilms. *SIAM Review* 52, 221–265. doi:https://doi.org/10.1137/080739720.
- Kloeden, P.E., Platen, E., 1992. Numerical Solution of Stochastic Differential Equations. Springer-Verlag. URL: https://doi.org/10.1007/978-3-662-12616-5.
- Martínez-López, N., Vilas, C., García, M.R., 2021. Comparativa entre modelos estocásticos de crecimiento bacteriano a distintas escalas, in: XLII Jornadas Automática. Servizo de Publicacións da UDC, pp. 442–449. URL: http://hdl.handle.net/2183/28358, doi:10.17979/spudc.9788497498043.442.
- McKinnon, K.M., 2018. Flow cytometry: An overview. *Current Protocols in Immunology* 120, 5.1.1–5.1.11. doi:https://doi.org/10.1002/cpim.40.
- Merdan, M., Bekiryazici, Z., Kesemen, T., Khaniyev, T., 2017. Comparison of stochastic and random models for bacterial resistance. *Advances in Difference Equations* 1, 133. doi:https://doi.org/10.1186/s13662-017-1191-5.
- Murray, C.J., Ikuta, K.S., Sharara, F., Swetschinski, L., Robles Aguilar, G., Naghavi, M., y col., 2022. Global burden of bacterial antimicrobial resistance in 2019: a systematic analysis. *The Lancet* 399, 629–655. doi:https://doi.org/10.1016/S0140-6736(21)02724-0.
- Pedreira, A., Vázquez, J.A., García, M.R., 2021. Morbidostato: un sistema de cultivo continuo para el estudio evolutivo de poblaciones bacterianas sometidas a estrés por compuestos antimicrobianos, in: Proc. del XXVIII Congreso de la Sociedad Española de Microbiología. URL: http://hdl.handle.net/10261/260798.
- Ranjbaran, M., Carciofi, B.A.M., Datta, A.K., 2021. Engineering modeling frameworks for microbial food safety at various scales. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety* 20, 4213–4249. doi:https://doi.org/10.1111/1541-4337.12818.
- Vande Wouwer, A., Saucez, P., Vilas, C., 2014. Simulation of ODE/PDE Models with Matlab, Octave Scilab: Scientific and Engineering Applications. Springer. URL: https://doi.org/10.1007/978-3-319-06790-2.
- Vilas, C., Arias-Méndez, A., García, M.R., Alonso, A.A., Balsa-Canto, E., 2018. Toward predictive food process models: A protocol for parameter estimation. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition* 58, 436–449. doi:https://doi.org/10.1080/10408398.2016.1186591.



Modelado dinámico y control de un fotobiorreactor de microalgas soportadas. Optimización de las condiciones de operación.



Felipe Palacios^{a,*}, Gonzalo Salazar^b, Carlos Rad^c, Daniel Sarabia^d

^a Dpto. de Ingeniería Electromecánica, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Burgos, Avd. Cantabria s/n, 09006, Burgos, España

^b Dpto. de Biotecnología y Ciencia de los Alimentos, Facultad de Ciencias, Universidad de Burgos, Plaza Misael Bañuelos, 09001, Burgos, España

^c Grupo de investigación en Compostaje (UBUCOMP), Escuela Politécnica Superior, Universidad de Burgos, C/ Villadiego s/n, 09001, Burgos, España

^d Dpto. de Ingeniería Electromecánica, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Burgos, Avd. Cantabria s/n, 09006, Burgos, España

Resumen

Las microalgas se han convertido en una fuente de materia prima muy prometedora para la alimentación, combustibles, fertilizantes, química fina, y con un gran potencial en la captura de CO₂ y en el tratamiento de aguas residuales. Tradicionalmente el cultivo de las microalgas se realiza en fotobiorreactores, tanto abiertos como cerrados, donde las microalgas crecen flotando en un medio acuoso, denominándose sistemas suspendidos. En estos sistemas el cosechado de la biomasa producida y su secado posterior conlleva un coste económico y un uso energético muy elevado debido a que hay que separar la biomasa diluida en grandes volúmenes líquidos del medio en el que crece. Por el contrario, en los denominados sistemas soportados, esta problemática desaparece ya que se introduce un sustrato en el medio acuoso donde las algas crecen fijadas a dicho sustrato. De esta manera se consigue una mayor concentración de biomasa con un contenido sólido mucho mayor, además de que el proceso de cosechado se simplifica al basarse basándose en métodos mecánicos de raspado del sustrato.

En este tipo de cultivos se distinguen tres fases. Una primera que consiste en la *adhesión inicial a la superficie del sustrato*, donde mediante ciertas reacciones bioquímicas se fija la célula al sustrato, seguida del *crecimiento sobre el sustrato*, donde es importante controlar el crecimiento algal y por último la *cosecha de la biomasa producida*, donde es esencial determinar la frecuencia de cosechado. Los factores que influyen en el crecimiento son propiedades del sustrato, propiedades de las células (tipo de microalgas) y factores operacionales, entre los que destacan, la duración de la etapa de crecimiento, la turbulencia, frecuencia del cosechado, luminosidad (intensidad y dirección), nutrientes (tipos y concentración), temperatura, pH, cantidad de CO₂, etc. Los sistemas soportados son relativamente nuevos, la primera publicación al respecto se hizo en 2010, lo que conforma un área interesante y prometedora en investigación, tanto básica como aplicada con multitud de temas abiertos (Wang et al. 2018), entre los que destacan el desarrollo de modelos matemáticos para poder simular el crecimiento de las microalgas y estudiar e incorporar los mecanismos químicos, físicos y biológicos de los que depende.

Finalmente, un punto importante es la evaluación económica de la inversión y operación de plantas de fotobiorreactores para determinar su viabilidad económica a nivel industrial (Tredici et al. 2016), así como la evaluación de la sostenibilidad energética del proceso, tal y como se plantea para fotobiorreactores cerrados de algas suspendidas (Tredici et al. 2015) evaluando energéticamente el rendimiento mediante el índice NER (Net Energy Ratio) o EROI (Energy on Return on Investment) y que puede extenderse en esta Tesis a los sistemas de crecimiento soportados.

En esta Tesis se propone la modelización de los procesos de crecimiento de microalgas en un fotobiorreactor de lámina vertical y rotatoria (Gross et al., 2013) sobre la que se soportan las algas, que posteriormente se recogen. El modelo se optimizará en base a varias funciones objetivo, y se comprobará sobre un reactor real la validez tanto del modelo como de las condiciones optimizadas establecidas, para su posterior aplicación a la depuración de aguas residuales.

Los objetivos de la presente Tesis se basan en, ver Imagen 1 a):

- Poner a punto un fotobiorreactor rotatorio, a escala de planta piloto, y en condiciones controladas, de biopelícula de microalgas soportada.
- Determinar las variables fundamentales que condicionan la operación del proceso.
- Desarrollar y validar experimentalmente un modelo dinámico del crecimiento de microalgas en el fotobiorreactor.
- Usando el modelo matemático obtenido y mediante métodos numéricos de optimización, determinar y caracterizar las condiciones de operación óptimas del fotobiorreactor y establecer el sistema de control adecuado para llevarlas a la práctica.
- Escalado del fotobiorreactor a otro de mayor tamaño que opera en un entorno real diferente a las condiciones controladas del laboratorio y en el que la presencia de perturbaciones importantes hace necesario establecer una adecuada estrategia de control para minimizar sus efectos y maximizar los rendimientos de producción.
- Estudiar la aplicación de las anteriores estrategias a fotobiorreactores industriales incluyendo su viabilidad económica.
- Aplicación a la depuración de aguas residuales.

*Autor para la correspondencia: fpc0001@alu.ubu.es

La estructura del prototipo del reactor, ver Imagen 1 b) se basa en dos columnas de madera verticales unidas por una horizontal en la parte superior, todo soportado por dos apoyos en el inferior de las mismas. Entre las dos columnas también se encuentra un eje donde se colocarán dos poleas que se encargarán de llevar el movimiento rotatorio del eje hacia dos correas. En estas correas irá adherido un film, superficie sobre la que se colocarán las algas y se producirá el crecimiento de las mismas. En la parte inferior del prototipo se encuentran dos cubetas llenas de agua por las que, gracias a un motor que gobierna el eje superior, pasará el film con las algas y hará que el agua intervenga en su crecimiento. Este prototipo está destinado a estar en una sala donde se pueda controlar la radiación que incide sobre las algas, los ciclos de luz, la temperatura ambiente, la temperatura del agua de las cubetas, el pH, el oxígeno disuelto, agitación, nutrientes y otras variables de interés en el crecimiento de las algas. El alto grado de automatización del prototipo (Arroyo, 2021) permitirá la ejecución automática y sistemática de experimentos en distintas condiciones de operación permitiendo el estudio posterior de los resultados para la obtención de modelos cinéticos y de las dinámicas de crecimiento de las algas en este tipo de reactores. Modelos que en una segunda fase puedan ser usados para el diseño del punto de operación óptimo y mejora del control del reactor, así como para el estudio del escalado del prototipo a un nivel industrial.

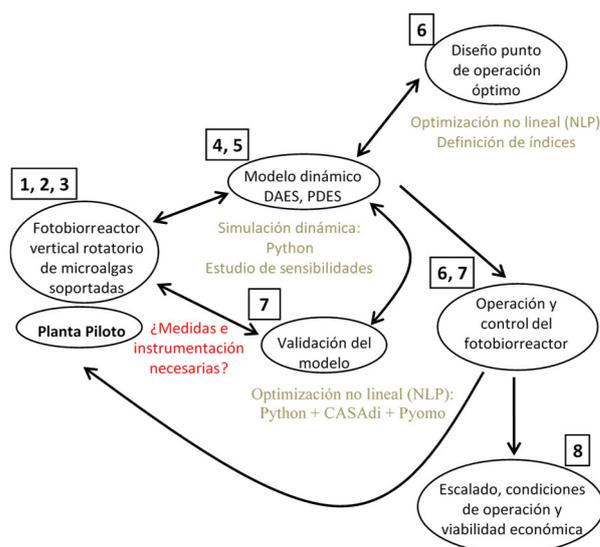


Imagen 1. a) Planteamiento de las tareas y etapas de la investigación. b) Prototipo de reactor de algas soportadas.

Experimentación actual

La presente Tesis se encuentra en su primera fase, la referente al estudio del modelo cinético de crecimiento de la microalga *Chlorella vulgaris* mediante el ajuste de datos experimentales. Para ello se ha inoculado el alga en 4 medios de cultivo (compuestos por BG11 y diferentes concentraciones de digestato ultrafiltrado) a los que se incorpora luz, haciendo uso para ello de paneles reflectantes que permitan obtener la mejor homogeneidad lumínica que reciben las diferentes muestras, así como oxigenación a través de una bomba. Se estudia la variación diaria mediante sonda multiparamétrica de los valores de temperatura, pH, conductividad, resistividad, sólidos totales disueltos y oxígeno disuelto, y se toman muestras periódicas de cada cultivo para el posterior análisis de parámetros como la biomasa total, medida de la clorofila mediante absorbancia, carbono orgánico total, nitrógeno total, así como de NO_3^- , NH_4^+ y PO_4^{3-} , parámetros todos ellos relacionados con el crecimiento algal.

Tras esta primera fase de familiarización con el modelo cinético de crecimiento en la que se harán uso de herramientas matemáticas de ajuste, se pasará a la fase de experimentación con el fotobiorreactor.

Referencias

- Arroyo, A. 2021. Automatización de un prototipo de biorreactor de algas soportadas. TFG Grado de Ingeniería Electrónica Industrial y Automática, Universidad de Burgos.
- Gross, M., Wesley H., Clayton M., Zhiyou W. 2013. Development of a rotating algal biofilm growth system for attached microalgae growth with in situ biomass harvest. *Bioresource Technology*, 150, 195-201.
DOI: 10.1016/j.biortech.2013.10.016
- Tredici, M. R., Bassi, N., Prussi, M., Biondi, N., Rodolfi, L., Chini Zittelli, G., Sampietro G. (2015) Energy balance of algal biomass production in a 1-ha "Green Wall Panel" plant: How to produce algal biomass in a closed reactor achieving a high Net Energy Ratio. *Applied Energy*, 154, 1103-1111.
DOI: 10.1016/j.apenergy.2015.01.086
- Tredici, M. R., Rodolfi, L., Biondi, N., Bassi, N., Sampietro, G. 2016. Techno-economic analysis of microalgal biomass production in a 1-ha Green Wall Panel (GWP®) plant. *Algal Research*, 19, 253-263.
DOI: 10.1016/j.algal.2016.09.005
- Wang, J. H., Zhuang, L. L., Xu, X. O., Deantes-Espinosa, V. M., Wang, X. X., Hu, H. Y. 2018. Microalgal attachment and attached systems for biomass production and wastewater treatment. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 92, 331-342.
DOI: 10.1016/j.rser.2018.04.081

Resumen

Los procesos industriales en su mayoría se comportan como sistemas de Múltiples Entradas y Salidas (MIMO). De ahí la necesidad de considerar para estos sistemas metodologías que permitan obtener el mejor ajuste de sus modelos. En este estudio se considera el uso de una plataforma de control de temperatura a escala pequeña como sistema MIMO, para obtener un modelo identificado en forma de funciones de transferencias basadas en el operador retardo unitario. La identificación del sistema usa datos experimentales recolectados a partir de entradas tipo escalón secuenciales, simultáneas y rotadas de ambas. El modelado se realiza utilizando el toolbox HIDENT, disponible para MATLAB, considerando los métodos de la salida del error y mínimos cuadrados. Una vez obtenidos los modelos, se realiza su validación considerando los criterios establecidos por los índices de Akaike (AIC) y el error de predicción final (FPE), a partir de datos experimentales adicionales. La validación realizada muestra que los modelos más precisos se obtienen a partir de entradas simultáneas.

1 Introducción

El modelado e identificación de sistemas es una de las disciplinas del control automático que tiene una gran relevancia en el diseño de los sistemas del control. A partir de este se pueden obtener representaciones simplificadas de los sistemas de procesos reales, las cuales permiten obtener relaciones entre las variables que describen los fenómenos y comportamientos de los sistemas considerados.

El modelado ha sido desarrollado y documentado, de manera amplia, para los sistemas SISO (Single Input Single Output) y MIMO (Multiple Input Multiple Output). La literatura existente contempla diversas técnicas y métodos que permiten obtener modelos continuos y discretos. Entre los modelos matemáticos más conocidos se pueden mencionar: funciones de transferencia (Bolton, 2004), espacios de estados (Mellodge, 2016), estructuras ARX (Diversi et al., 2010), entre otros. En el caso de modelos lineales, se pueden obtener modelos al considerar entradas de tipo impulsional o escalón (Liu & Gao, 2012). Por otro lado, los métodos de estimación de modelos son diversos y dentro de estos se pueden mencionar los siguientes: basados en correlaciones (de Leeuw, 1983), estimación espectral (Blahut, 2002), minimización y/o predicción del error (Åström, 1980), minimización de la distancia paramétrica (Parr & Schucany, 1980), entre otros.

Uno de los métodos con mayor difusión, a nivel industrial y de investigación, consiste en la realización de pruebas de tipo escalón en lazo abierto. En este método, se realizan cambios de tipo escalón en las variables manipuladas $U_j(t)$ para obtener datos que describen la dinámica del proceso de las variables controladas $Y_i(t)$, tomando en cuenta los elementos de control involucrados en los lazos considerados (Figura 1). (Liu & Gao, 2012)

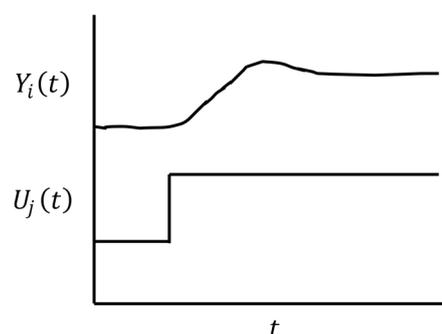


Figura 1: Prueba escalón en lazo abierto

Los modelos obtenidos para sistemas con una entrada son precisos, ya que la dinámica de las variables de salidas solo se ven influenciadas por esta. No obstante, los sistemas MIMO tienen un grado elevado de incertidumbre debido a que, en función de las interacciones que existen entre las variables del proceso, pueden obtenerse modelos poco precisos que representen el comportamiento real del sistema. Esto conlleva que se deba destinar una cantidad considerable de recursos computacionales y de tiempo en recolectar datos que permitan modelar de forma precisa los sistemas multivariables. Es por ello que algunos investigadores han desarrollado estudios para validar el modelado en sistemas MIMO de algunos procesos (Ahmed & Intiaz, 2015; Conner & Seborg, 2004; Nema & Padhy, 2015; Zhu, 1998).

2 Descripción del Problema

El modelado de sistemas multivariables es requerido para implementar estrategias de control predictivo en dispositivos lógicos programables, campo en el cual se encuentra investigando el Grupo de Investigación en Control y Supervisión de Procesos (GIR-CSP) y el Instituto de Procesos Sostenibles (ISP) de la Universidad de Valladolid (UVa).

Para ello, se considera como sistema multivariable una plataforma de control de temperatura a escala pequeña.

2.1 Plataforma de Control de Temperatura (PCTemp)

Este dispositivo (Figura 1) ha sido rediseñado por la Universidad de La Rioja (Rico-Azagra & Gil-Martínez, 2021) para la docencia en control de procesos, a partir del dispositivo TCLab (Hedengren, 2020). El P&ID del dispositivo se muestra en la Figura 2.

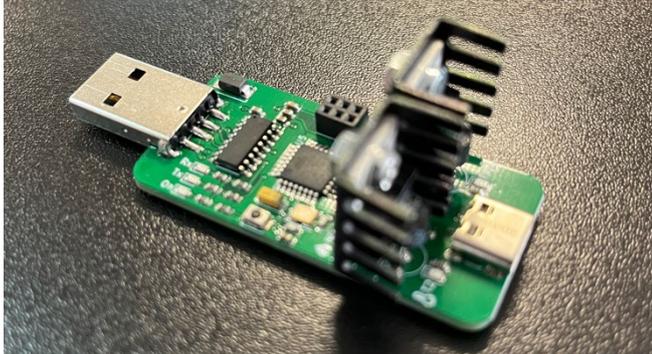


Figura 1: Plataforma de control de temperatura (PCTemp)

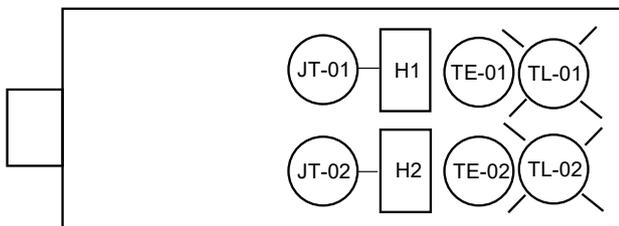


Figura 2: P&ID de la plataforma de control de temperatura

La PCTemp posee dos transistores que son utilizados como generadores de calor en función de la potencia eléctrica suministrada (JT-01/02) y dos sensores de temperaturas TMP36 (TE-01/02) que registran la temperatura de salida de cada transistor. Debido a la cercanía de ambos sensores, estos se ven afectados por cambios realizados en ambas variables de entrada. En la Tabla 1 se observan detalles de la instrumentación presente en el dispositivo.

Tabla 1: Detalles de las variables del PCTemp

Variables			
P&ID	Control	Descripción	Rango
TE-01	Y1	Temp. Heater 1	0-100 °C
TE-02	Y2	Temp. Heater 2	0-100 °C
JT-01	U1	Potencia Heater 1	0-100 %
JT-02	U2	Potencia Heater 2	0-100 %
TL-01	N/A	Luz Piloto Heater 1	N/A
TL-02	N/A	Luz Piloto Heater 2	N/A

3 Metodología

La identificación del sistema se lleva a cabo a partir de la realización de pruebas en lazo abierto con entradas tipo escalón para las variables manipuladas U tomando en cuenta entradas secuenciales, simultáneas y las rotadas de ambas.

Las entradas rotadas se obtienen a partir de las definiciones realizadas por (Conner & Seborg, 2004). En este estudio, se verifica que los modelos obtenidos utilizando entradas simultáneas y rotadas para modelos ARX son más precisos. Es por ello que se desea verificar este tipo de entradas

en el estudio realizado para los modelos en funciones de transferencias a obtener.

Para obtener las entradas rotadas, se debe partir de la definición de la matriz de ganancia estacionaria de un sistema multivariable. Si se considera un sistema multivariable en estado estacionario definido por:

$$Y = KU \quad (1)$$

donde Y corresponden con los m elementos del vector de salida de las variables de proceso, K es la matriz de ganancias estacionaria de tamaño $m \times n$ y U corresponde con el vector de entrada de las variables manipuladas, con n elementos.

La transformación de las variables del vector U a $Urot$ rotadas se realiza a partir de la descomposición en valores singulares de la matriz de ganancias estacionarias del sistema.

$$K = W\Sigma V^T \quad (2)$$

donde W y V son matrices ortogonales y Σ es la matriz diagonal de los valores singulares. La ortogonalidad significa que $V^T V = V V^T = I$ y $W^T W = W W^T = I$, donde I es la matriz identidad.

La matriz Σ se define como:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_n \end{bmatrix} \quad (3)$$

De esta manera, los valores rotados $Urot$ están definidos por la Ec. 4:

$$Urot \triangleq \alpha \tilde{U} V^T \quad (4)$$

donde $\alpha = \sigma_1^{-1}$ y $\tilde{U} \triangleq [U_1 \ U_2 \ \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \cdots U_n \ \frac{\sigma_1}{\sigma_n}]$.

A continuación, el modelado de los sistemas se realiza mediante el uso del toolbox HIDENT (Sanzo & De Prada Moraga, 1996) disponible para MATLAB. El modelo que se considera es la función de transferencia mediante el operador retardo unitario q^{-1} , la cual tiene la forma de:

$$Y_i(t) = \sum_{j=1}^n \frac{B_{ij}(q^{-1})}{A_{ij}(q^{-1})} U_j(t) \quad (5)$$

Donde $B_{ij}(q^{-1})$ y $A_{ij}(q^{-1})$ son los polinomios numerador y denominador para cada par de entrada-salida.

La selección de este tipo de modelo se basa en la simplificación de la carga de información en los dispositivos lógicos programables. Por otro lado, los métodos de estimación de modelos considerados son el de mínimos cuadrados (LS) y el error de la salida (OE).

En el método de mínimos cuadrados se minimiza la suma de los cuadrados de los valores residuales, siendo este último la diferencia entre el valor de la respuesta observada y el valor de la respuesta ajustada. La Ec. 6 define este método para cada salida.

$$S_i = \sum_{x=1}^r (Y_{ix} - Y_{ixmod})^2 \quad (6)$$

Donde r es el número de puntos incluidos en el ajuste, x es el valor de la variable y el modelo en cada instante y S es la suma de cuadrados de estimación del error.

El método de error de la salida (OE) minimiza la función del error entre la salida observada y la salida del modelo obtenido. En este caso, el modelo tiene dos polinomios activos B y A . Este método está definido por la Ec. 7.

$$P_i = \frac{1}{r} \sum_{x=1}^r \left(Y_{ix} - \sum_{j=1}^n \frac{B_{ij}(q^{-1})}{A_{ij}(q^{-1})} U_{jx} \right)^2 \quad (7)$$

Una vez generados los modelos, se realiza un análisis de estos a partir de las ganancias y polos obtenidos.

La validación de los modelos obtenidos se realiza mediante los comportamientos que generan los mismos a partir

de datos de entrada experimentales adicionales. Además, se utilizan los criterios establecidos por los índices de Akaike (AIC) y del error de predicción final (FPE). Con estos índices, cuando se tiene un valor bajo del índice mejor es la calidad del modelo.

El índice de Akaike (Akaike, 1974) penaliza la complejidad de la estructura del modelo y el residuo. Se basa en la entropía de la información. La Ec. 8 define el índice de Akaike (AIC) para el caso general.

$$AIC = 2f - 2\ln(L) \quad (8)$$

donde f es el número de parámetros del modelo estadístico y L es el valor máximo de la función de verosimilitud para el modelo estimado.

El índice de error de predicción final (Niedźwiecki & Ciołek, 2017) proporciona una medida de la calidad del modelo a partir de la penalización de la energía del residuo. La Ec. 9 define el índice de error de predicción final (FPE).

$$FPE = \det\left(\frac{1}{r}\sum_1^r e(t, \hat{\theta}_r) (e(t, \hat{\theta}_r))^T\right) \left(\frac{1+f/r}{1-f/r}\right) \quad (9)$$

donde r es el número de valores del conjunto de datos de estimación, $e(t)$ es un vector del error de predicción, θ_r representa los parámetros estimados y f es el número de parámetros estimados.

4 Resultados y Discusión

Las pruebas en lazo abierto para el PCTemp se llevan a cabo en MATLAB y Simulink, considerando las librerías desarrolladas por (Rico-Azagra & Gil-Martínez, 2021) para este entorno. Tras un experimento simple donde se analiza la influencia de cada entrada en cada salida, la matriz de ganancias estacionarias obtenida para este dispositivo es la siguiente:

$$\begin{bmatrix} Y1 \\ Y2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7130 & 0.1930 \\ 0.3320 & 0.6720 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U1 \\ U2 \end{bmatrix} \quad (10)$$

Las entradas a considerar de las variables manipuladas $U1$ e $U2$ se definen de forma secuencial y simultáneas, con sus correspondientes entradas rotadas obtenidas a partir de la Ec. 4. Así, se tienen los tipos de entradas utilizados en las figuras 4 y 5.

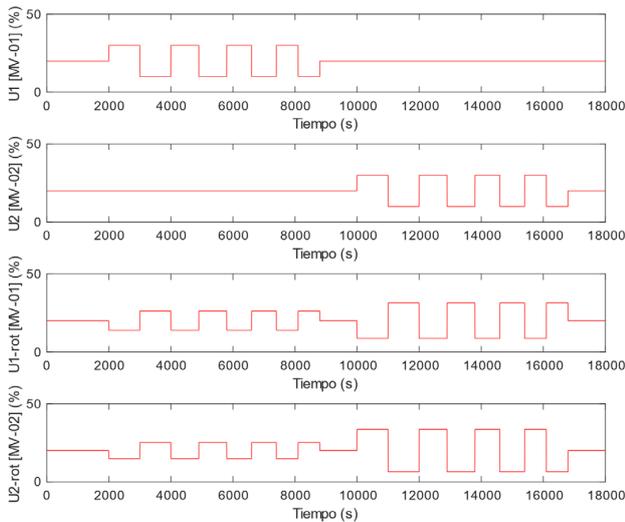


Figura 4: Entradas secuenciales y secuenciales rotadas consideradas para la identificación del PCTemp

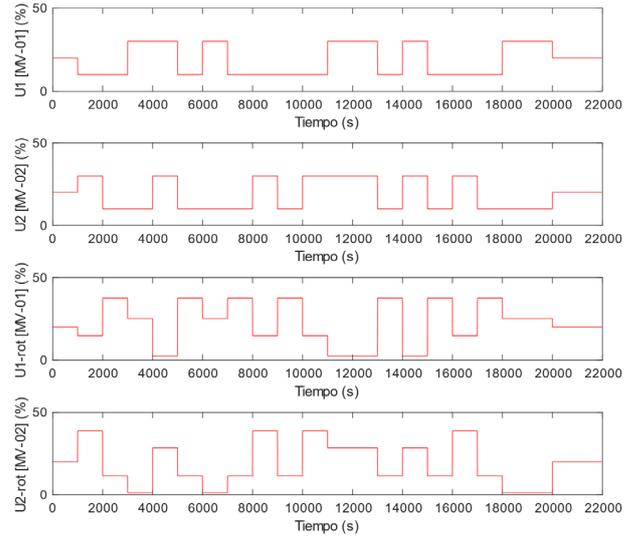


Figura 5: Entradas simultáneas y simultáneas rotadas consideradas para la identificación del PCTemp

Las pruebas realizadas consideran un período de muestreo de 0.5 s. Por otro lado, en los valores $Y1$ e $Y2$ obtenidos se confirma la presencia de ruido en la señal. Para ello, se realiza un pretratamiento de los datos, en el cual se modifica el período de muestreo a 8 s y se realiza un filtrado pasa-alto de $w = 0$ rad/s y un filtrado pasa-bajo de $w = 0.0071$ rad/s. A partir de estos datos procesados, se realiza la identificación del sistema, obteniéndose modelos cuyos polos se resumen en la Tabla 3 y las ganancias en la Tabla 4. Los modelos obtenidos, en función de transferencia con el operador retardo unitario q^{-1} , tienen un comportamiento similar a un sistema de primer orden (Figura 6).

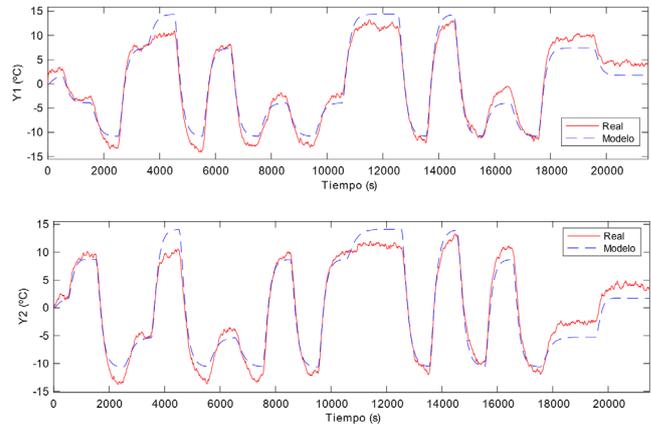


Figura 6: Modelos obtenidos para las entradas simultáneas con el método OE

Al evaluar la estabilidad de los modelos, de acuerdo a los resultados obtenidos en la Tabla 3, se puede observar que todos los modelos son estables.

Tabla 3: Polos obtenidos para los modelos generados en el PCTemp

Variables	Entradas	Y1		Y2	
		OE	LS	OE	LS
Secuenciales	U1	0.9138	0.9354	0.9642	0.9439
	U2	0.9486	0.9354	0.9036	0.9439
Simultáneas	U1	0.9192	0.9542	0.9568	0.9522
	U2	0.9362	0.9452	0.9084	0.9522
Secuenciales	U1	0.9075	0.9290	0.9519	0.9212
Rotadas	U2	0.8927	0.9290	0.9166	0.9212
Simultáneas	U1	0.9144	0.9344	0.9195	0.9560
Rotadas	U2	0.9314	0.9344	0.9127	0.9560

Tabla 4: Ganancias obtenidos para los modelos generados en el PCTemp

Variables	Entradas	Y1		Y2	
		OE	LS	OE	LS
Secuenciales	U1	0.7932	0.8538	0.3128	0.2732
	U2	0.3550	0.3321	0.8944	0.9412
Simultáneas	U1	0.9128	0.9400	0.2700	0.9522
	U2	0.3418	0.3427	0.9685	0.2804
Secuenciales	U1	0.8017	0.8789	0.2552	0.2154
Rotadas	U2	0.1791	0.2495	0.9205	0.9144
Simultáneas	U1	0.8012	0.8638	0.2390	0.2074
Rotadas	U2	0.2288	0.2606	0.8981	0.8965

Por otro lado, se obtuvieron los índices AIC y FPE a partir de datos experimentales de validación (Tabla 5), tomando en cuenta las entradas indicadas en la Figura 7.

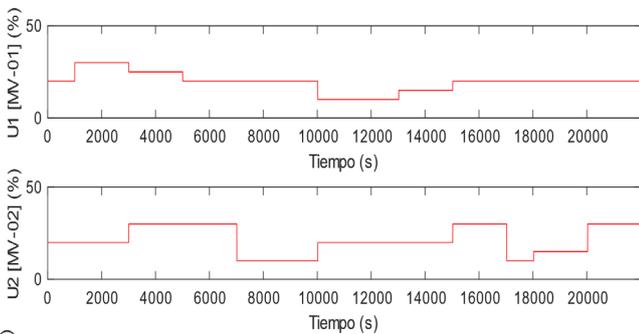


Figura 7: Entradas consideradas para la validación de los modelos del PCTemp

Tabla 5: Índices obtenidos para los modelos validados en el PCTemp

Entrada	Índice	Y1		Y2	
		OE	LS	OE	LS
Secuenciales	AIC	7591.77	7480.50	4676.08	5762.50
	FPE	2.76	2.43	1.70	2.09
Simultáneas	AIC	5539.72	5478.48	5910.76	6703.32
	FPE	2.01	1.99	2.14	2.43
Secuenciales	AIC	11750.39	7327.00	5277.50	5819.68
Rotadas	FPE	4.27	2.66	1.91	2.11
Simultáneas	AIC	9701.87	7339.29	6958.77	6968.77
Rotadas	FPE	3.52	2.66	2.53	2.53

Al observar los resultados obtenidos para los índices de validación en la Tabla 5, se puede observar que los modelos obtenidos con las entradas simultáneas mediante el método

OE generan mejores resultados y modelos más precisos respecto a los demás. Se esperaba que las entradas rotadas mejoraran los indicadores considerados para la selección del modelo, lo cual no ocurrió. Así, el comportamiento del modelo para la validación a partir de datos experimentales es el que se muestra en la Figura 8.

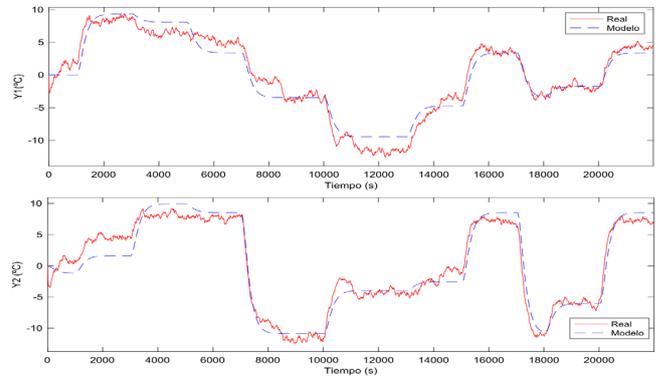


Figura 8: Validación del modelo obtenido con el método OE para las entradas simultáneas

De esta manera, el modelo del dispositivo PCTemp obtenido a partir de entradas simultáneas mediante el método OE es el siguiente:

$$\begin{bmatrix} Y1 \\ Y2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.0737q^{-1} & 0.0222q^{-1} \\ 1-0.9192q^{-1} & 1-0.9362q^{-1} \\ 0.0116q^{-1} & 0.0887q^{-1} \\ 1-0.9568q^{-1} & 1-0.9084q^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix} \quad (7)$$

Conclusiones

Al considerar diversos tipos de entradas múltiples en el modelado de una plataforma de control de temperatura, se valida que el uso de entradas simultáneas mediante el método de la salida del error genera modelos, en funciones de transferencia con el operador retardo unitario, más precisos, tomando como referencia los índices AIC y FPE. Por otro lado, las entradas rotadas consideradas no mejoran el desempeño del modelo basado en funciones de transferencias.

El modelo obtenido de la plataforma de control de temperatura, en conjunto con otros sistemas MIMO a identificar, se van a usar como sistemas de procesos en las implementaciones de estrategias de control predictivo en los dispositivos programables lógicos. El objetivo es evaluar la factibilidad en la ejecución de estas estrategias de control avanzado, en dispositivos de bajo coste económico y con amplia adopción en la industria.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido realizado parcialmente gracias al apoyo de los Contratos Predoctorales 2019 de la Universidad de Valladolid, y la Conserjería de Educación de la Junta de Castilla y León, con fondos EU-FEDER (CLU-2017-09, VA232P18, UIC 225).

Referencias

- Ahmed, S., & Imtiaz, S. A. 2015. Identification of MIMO Continuous-Time Models Using Simultaneous Step Inputs. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 54(29), 7251-7260. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5b00481>
- Akaike, H. 1974. A new look at the statistical model identification. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 19(6), 716-723. <https://doi.org/10.1109/TAC.1974.1100705>
- Åström, K. J. 1980. Maximum likelihood and prediction error methods. *Automatica*, 16(5), 551-574. [https://doi.org/10.1016/0005-1098\(80\)90078-3](https://doi.org/10.1016/0005-1098(80)90078-3)
- Blahut, R. E. (2002). Information Theory and Coding. In W. M. Middleton & M. E. Van Valkenburg (Eds.), *Reference Data for Engineers (Ninth Edition)* (pp. 25-21-25-31). Newnes. <https://doi.org/10.1016/B978-075067291-7/50027-3>
- Bolton, W. (2004). Transfer function. In W. Bolton (Ed.), *Instrumentation and Control Systems* (pp. 200-218). Newnes. <https://doi.org/10.1016/B978-075066432-5/50009-7>
- Conner, J. S., & Seborg, D. E. 2004. An Evaluation of MIMO Input Designs for Process Identification. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 43(14), 3847-3854. <https://doi.org/10.1021/ie034068>
- de Leeuw, J. 1983. Models and methods for the analysis of correlation coefficients. *Journal of Econometrics*, 22, 113-137. [https://doi.org/10.1016/0304-4076\(83\)90096-9](https://doi.org/10.1016/0304-4076(83)90096-9)
- Diversi, R., Guidorzi, R., & Soverini, U. 2010. Identification of ARX and ARARX Models in the Presence of Input and Output Noises. *European Journal of Control*, 16(3), 242-255. <https://doi.org/10.3166/ejc.16.242-255>
- Hedengren, J. D. 2020. *Temperature Control Lab Kit (TCLab)*. Consultado el 21.03.2022 from <http://apmonitor.com/pdc/index.php/Main/ArduinoTemperatureControl>
- Liu, T., & Gao, F. 2012. *Industrial Process Identification and Control Design: Step-test and Relay-experiment-based Methods*. Springer, London, UK.
- Mellodge, P. (2016). Chapter 2 - System Modeling. In P. Mellodge (Ed.), *A Practical Approach to Dynamical Systems for Engineers* (pp. 17-145). Woodhead Publishing. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-100202-5.00002-4>
- Nema, S., & Padhy, P. K. 2015. Identification of two-input two-output process using state-space analysis [Article]. *Iet Control Theory and Applications*, 9(13), 2029-2038. <https://doi.org/10.1049/iet-cta.2014.1079>
- Niedźwiecki, M., & Ciołek, M. 2017. Akaike's final prediction error criterion revisited. *2017 40th International Conference on Telecommunications and Signal Processing (TSP)*, 237-242. <https://doi.org/10.1109/TSP.2017.8075977>
- Parr, W. C., & Schucany, W. R. 1980. Minimum Distance and Robust Estimation. *Journal of the American Statistical Association*, 75(371), 616-624. <https://doi.org/10.1080/01621459.1980.10477522>
- Rico-Azagra, J., & Gil-Martínez, M. 2021. Rediseño de una plataforma de control de temperatura de bajo coste para la educación en ingeniería de control. *Actas de 42 Jornadas de Automática*, 275-281. <https://doi.org/spudc.9788497498043.275>
- Sanzo, M., & De Prada Moraga, C. (1996). HIDEN - Una interfase gráfica para identificación de sistemas. CONAI'96, La Habana, Cuba.
- Zhu, Y. 1998. Multivariable process identification for mpc: the asymptotic method and its applications. *Journal of Process Control*, 8(2), 101-115. [https://doi.org/10.1016/S0959-1524\(97\)00035-8](https://doi.org/10.1016/S0959-1524(97)00035-8)

MSO Minimización de riesgo en programación de operaciones de crudos en una refinería

Modelado,
Simulación y
Optimización



Tomás García García-Verdier^{*a}, Gloria Gutiérrez^a, Carlos Méndez^b, Carlos G. Palacín^a, César de Prada^a

^a Departamento de Ingeniería de Sistemas y Automática. Universidad de Valladolid. C/ Real de Burgos s/n, 47011, Valladolid, España.

^b Center for Advanced Process Systems Engineering (CAPSE), INTEC (UNL - CONICET), Dpto. Ingeniería Industrial (FIQ-UNL), Güemes 3450, 3000, Santa Fe, Argentina.

Resumen

El presente artículo se focaliza en la formulación y optimización de la programación de operaciones de crudos en una refinería con terminal marítima. Uno de los principales desafíos yace en coordinar la toma de decisiones en ambas instalaciones y, al mismo tiempo, lidiar con las incertidumbres inherentes a esta actividad. Como solución, se desarrolla un modelo de programación matemática mixto entero no lineal con formulación de tiempo continuo. Además, se tiene en cuenta la incertidumbre en las fechas de llegada de los barcos a través de un enfoque de programación estocástica de dos etapas. Por último, se emplea la medida de riesgo Valor en Riesgo Condicional para evaluar la probabilidad de incurrir en costos elevados asociados a los peores escenarios.

1. Introducción

La optimización de la programación de operaciones en una refinería con terminal marítima es un problema complejo que involucra: la asignación de barcos a tanques y de tanques a unidades de destilación, el cálculo de volúmenes transferidos entre recursos, y el cálculo de la composición de las mezclas. Así pues, la programación matemática constituye una herramienta muy útil en el desarrollo de esta actividad.

Una gran variedad de artículos aborda este problema (Furman et al., 2007; Jia et al., 2003; y Lee et al., 1996). En los mismos se estudian refinerías compuestas por tanques de almacenamiento y carga por separado. Los tanques de almacenamiento se emplean para recibir y almacenar los crudos y los tanques de carga se utilizan para la preparación de las mezclas que alimentan a las unidades de destilación.

Un número menor de trabajos se ha centrado en refinerías sin tanques de carga. En esta clase de refinerías, el proceso de mezclado se lleva a cabo en los tanques de almacenamiento o en las tuberías que alimentan a las unidades de destilación. Algunos de los trabajos más relevantes son Cerdá et al. (2015), Pinto et al. (2000), y Reddy et al. (2004).

Los trabajos mencionados previamente abordan el problema con un enfoque determinístico. Sin embargo, también se han desarrollado modelos de programación estocástica.

En Wang and Rong (2010), se propuso un modelo robusto de dos etapas considerando incertidumbre en la llegada de barcos y en la demanda de productos. Cao et al. (2010) desarrolló un modelo con restricciones probabilísticas considerando incertidumbre en la demanda. Oliveira et al. (2016) propuso un modelo de optimización estocástica de dos etapas que resuelve la programación del bombeo de crudos a través del oleoducto y la descarga de los barcos en la terminal. Es preciso señalar que estos autores desarrollaron modelos basados en formulación discreta del tiempo.

En este artículo, se desarrolla un modelo de programación estocástica de dos etapas, mixto entero no lineal (MINLP) con representación continua del tiempo, para resolver el problema de programación de operaciones de crudos en una refinería

con terminal marítima. Además, se extiende el modelo propuesto mediante la incorporación de la medida Valor en Riesgo Condicional (CVaR) en la función objetivo.

Según el conocimiento de los autores, ningún otro trabajo considera el desarrollo de un modelo de programación estocástica de dos etapas con formulación de tiempo continuo e incorporación de CVaR para la optimización de la programación de operaciones de crudos.

El resto del artículo se estructura de la siguiente manera. La definición del problema bajo estudio se da en la sección 2. La formulación matemática se desarrolla en la sección 3. La técnica de evaluación y gestión del riesgo se presenta en la sección 4. La estrategia de resolución propuesta se describe en la sección 5. Luego, en la sección 6, se reporta un ejemplo y los resultados obtenidos. Finalmente, las conclusiones se presentan en la sección 7.

2. Descripción del problema

En muchas ocasiones, el suministro de crudos a una refinería se da a través de barcos los cuales arriban a una terminal marítima próxima a la misma. Dicho sistema refinería-terminal está conectado por un oleoducto.

En la Figura 1 se muestra un esquema característico de una refinería con acceso marítimo. Se cuenta con un sistema de amarre a punto único, un oleoducto, tanques de almacenamiento, tuberías de alimentación y unidades de destilación de crudos. Además, se realizan operaciones como la descarga de crudos a múltiples tanques de almacenamiento desde barcos, la mezcla de crudos en los tanques y tuberías, y la alimentación a unidades de destilación con caudales variables a lo largo del horizonte de planificación.

Resulta importante destacar la complejidad que supone coordinar las decisiones tomadas en la terminal y en la refinería ya que sus objetivos difieren. Mientras que en la primera se busca descargar los barcos lo más pronto posible, para evitar costos por demoras; en la segunda se persigue disponer de los crudos en los momentos y cantidades más convenientes para cumplir con el plan de producción.

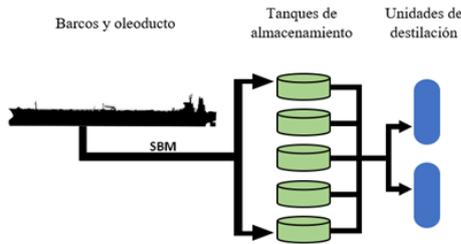


Figura 1: Esquema general de operaciones e instalaciones en una refinería con acceso marítimo

Además, las incertidumbres son inherentes al proceso debido a la dependencia existente entre el suministro de crudos y las condiciones climáticas. Dichas condiciones impactan en la fecha de llegada de los barcos y, por ende, en el inicio de las actividades de descarga y en el resto de decisiones que deben tomarse aguas abajo.

Para abordar este problema, se propone un modelo basado en programación estocástica de dos etapas con recurso (Birge and François Louveaux, 2011). Esencialmente, esta clase de modelo involucra dos tipos de variables de decisión: variables de primera etapa (“aquí y ahora”) las cuales deben implementarse ahora e influyen en las decisiones futuras, y las variables de segunda etapa que se implementarían luego cuando hubiera más información disponible acerca del proceso (variables de recurso, “esperar y ver”).

En este artículo, las variables de primera etapa refieren a aquellas relacionadas con el suministro de mezclas a las unidades de destilación, es decir, la asignación de tanques a unidades y los volúmenes totales transferidos. Los tiempos de inicio, de fin y la duración de los slots también constituyen decisiones de primera etapa. Respecto a las decisiones de segunda etapa, estas incluyen a las variables relacionadas con las actividades desarrolladas en la terminal marítima, el nivel de inventario en los tanques, y la composición de las mezclas de alimentación, esto es, la cantidad transferida de cada tipo de crudo desde los tanques a las unidades de destilación.

Como se mencionó anteriormente, el suministro de crudos está sujeto a incertidumbre debido a posibles desviaciones en las fechas de llegada programadas para los barcos. Esta incertidumbre se representa mediante un conjunto discreto de escenarios que contemplan diferentes fechas de arribo.

Se tienen en cuenta los siguientes datos para la resolución del problema: conjunto de escenarios con sus respectivas probabilidades de ocurrencia, fechas de llegada de los barcos en cada escenario, volumen y tipo de crudo transportado; límites en los caudales de transferencia entre recursos; cantidad de tanques, sus capacidades de almacenamiento e inventarios iniciales; información de las unidades, tales como, demanda y especificaciones de calidad que deben cumplir las mezclas de alimentación; por último, costos de espera de barcos y de partida tardía, y costos debido a diferencias entre volumen procesado y demanda requerida.

3. Formulación del modelo

En esta sección, se presenta el modelo *MINLP* de programación estocástica en dos etapas. Es importante aclarar que la precedencia entre barcos no está sujeta al orden de los elementos del conjunto, como se plantea en Cerda et al. (2015), y tampoco existe una preasignación de *slots* de tiempo para cada barco como sucede en Reddy et al. (2004). En el presente trabajo se emplea una “precedencia predefinida” que

tiene el conjunto de *slots* preordenado, y el algoritmo de optimización solo debe asignar cada barco a algunos de esos *slots*; Gómez Palacín et al. (2019) and Gómez Palacín (2020).

Además, es necesario mencionar las siguientes características del modelo. El horizonte de planificación se divide en *slots* de duración variable los cuales están sincronizados a lo largo de todos los tanques. El comienzo y el final de cada *slot* son representados por las variables is_s y ts_s , respectivamente. Se definen tres estados mutuamente excluyentes para los tanques: carga, descarga y reposo; los cuales se representan en la Figura 2 mediante las variables $xq_{q,s}$, $yq_{q,s}$, y $zq_{q,s}$, respectivamente. Se activa un nuevo *slot* siempre que ocurra un cambio de estado en alguno de los tanques.

No obstante, un tanque puede mantener el mismo estado a lo largo de *slots* consecutivos.

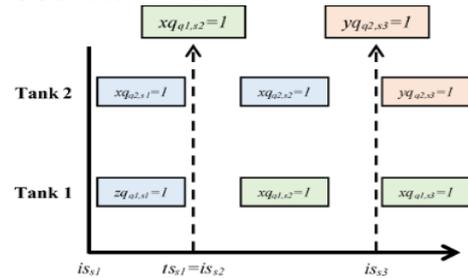


Figura 2: Esquema de la formulación de tiempo continuo

3.1 Supuestos del modelo

La formulación del modelo propuesto se basa en las siguientes suposiciones:

1. Existe un único punto de amarre y un oleoducto que conecta a la terminal con la refinería, por lo tanto, solo es posible descargar un barco a la vez.
2. Un buque que haya iniciado su descarga solo puede abandonar la terminal cuando se vacíe completamente.
3. Cada barco transporta un único tipo de crudo y se considera que el volumen retenido en el oleoducto es despreciable frente a la cantidad a descargar.
4. Un tanque no puede recibir crudo y alimentar a una unidad simultáneamente. Además, debe permanecer inactivo cierto tiempo luego de recibir una carga.
5. Se permite, como máximo, la carga de dos tanques a la vez y no se permiten transferencias entre tanques.
6. Un tanque puede alimentar como máximo a dos unidades de destilación de manera simultánea.
7. Una unidad de destilación puede ser alimentada, como máximo, por tres tanques a la vez y se consideran despreciables los tiempos de cambio de tanques.
8. Se asume mezcla perfecta tanques y tuberías.
9. No se puede detener la alimentación a las unidades de destilación.

3.2 Nomenclatura

Conjuntos

- S = *slots* de tiempo.
- B = barcos.
- Q = tanques.
- U = unidades de destilación de crudo.
- C = tipos de crudos.
- K = propiedades de crudos.
- E = escenarios.

Parámetros

- H = longitud del horizonte de planificación.
- \overline{FQ}_q = caudal máximo de carga del tanque q .
- \underline{FQ}_q = caudal mínimo de carga del tanque q .
- \overline{FB}_b = caudal máximo de descarga del barco b .
- \underline{FB}_b = caudal mínimo de descarga del barco b .
- \overline{OFQ}_q = caudal máximo de descarga del tanque q .
- \underline{OFQ}_q = caudal mínimo de descarga del tanque q .
- \overline{FU}_u = caudal máximo de carga de la unidad u .
- \underline{FU}_u = caudal mínimo de carga de la unidad u .
- $PR_{c,k}$ = concentración volumétrica de la propiedad k en el crudo c .
- $\overline{PROP}_{u,k}$ = máxima concentración permitida de la propiedad k en la alimentación de la unidad u .
- $\underline{PROP}_{u,k}$ = mínima concentración permitida de la propiedad k en la alimentación de la unidad u .
- \overline{CAP}_q = capacidad máxima del tanque q .
- \underline{CAP}_q = nivel de inventario mínimo en tanque q .
- ST = tiempo mínimo de reposo de un tanque.
- dem_u = volumen total demandado por la unidad u .
- COP_u = costo unitario de sobreproducción en unidad u .
- CSP_u = costo unitario de subproducción en unidad u .
- $AT_{b,e}$ = fecha de llegada del barco b en escenario e .
- $EDT_{b,e}$ = fecha de partida del barco b en escenario e .
- $CDMG_b$ = costo unitario de espera del barco b .
- $CTDN_b$ = costo unitario de partida tardía del barco b .
- $Vol_{b,c}$ = volumen de crudo c transportado por barco b .
- $IIC_{q,c}$ = inventario inicial de crudo c en el tanque q .
- $CONC_{q,c}$ = concentración inicial de crudo c en el tanque q .
- α = nivel de significación del $CVaR$.
- λ = coeficiente de importancia relativa del $CVaR$.
- π_e = probabilidad de ocurrencia del escenario e .

Variables

- ts_s = fin del $slot$ s .
- is_s = inicio del $slot$ s .
- ds_s = duración del $slot$ s .
- $fc_{bq,c,b,q,s,e}$ = volumen de crudo c transferido desde barco b al tanque q durante el $slot$ s en el escenario e .
- $fb_{qb,q,s,e}$ = volumen transferido desde el barco b al tanque q durante el $slot$ s en el escenario e .
- $fc_{cb,b,s,e}$ = volumen de crudo c descargado desde el barco b durante el $slot$ s en el escenario e .
- $fqu_{q,u,s}$ = volumen transferido desde el tanque q a la unidad u durante el $slot$ s .
- $fcqu_{c,q,u,s,e}$ = volumen de crudo c descargado desde tanque q a unidad u durante $slot$ s en el escenario e .
- $fu_{u,s}$ = volumen transferido a unidad u durante $slot$ s .
- $ic_{q,c,s,e}$ = volumen de crudo c en el tanque q al inicio del $slot$ s en el escenario e .
- $i_{q,s,e}$ = nivel de inventario en el tanque q al inicio del $slot$ s en el escenario e .
- $ie_{q,s,e}$ = nivel de inventario en el tanque q al final del horizonte en el escenario e .
- $ice_{q,c,s,e}$ = volumen de crudo c en el tanque q al final del horizonte en el escenario e .

- op_u = volumen excedente de producción respecto a la demanda de u .
- sp_u = volumen faltante de producción respecto a la demanda de u .
- $dmg_{b,e}$ = demora del barco b en el escenario e .
- $dmgs_{b,s,e}$ = variable auxiliar para calcular $dmg_{b,e}$.
- $dep_{b,s,e}$ = tiempo de partida del barco b en el escenario e .
- $tdn_{b,e}$ = tardanza del barco b en el escenario e .
- $tdns_{b,s,e}$ = variable auxiliar para calcular $tdn_{b,e}$.
- ze_e = costo asociado al escenario e .
- var = Valor en Riesgo.
- $cvar$ = Valor en Riesgo Condicional.
- ϕ_e = variable auxiliar para evaluar $CVaR$.

Variables binarias

- $xb_{b,s,e}$ = vale 1 si el barco b se descarga durante el $slot$ s en el escenario e .
- $xid_{b,s,e}$ = vale 1 si el barco b comienza su descarga al inicio del $slot$ s en el escenario e .
- $xfd_{b,s,e}$ = vale 1 si el barco b finaliza su descarga al final del $slot$ s en el escenario e .
- $xq_{q,s,e}$ = vale 1 si el tanque q se carga durante el $slot$ s en el escenario e .
- $y_{q,u,s}$ = vale 1 si el tanque q alimenta a la unidad de destilación u durante el $slot$ s .
- $yq_{q,s}$ = vale 1 si tanque q se descarga durante el $slot$ s .
- $zq_{q,s,e}$ = vale 1 si el tanque q se encuentra inactivo durante el $slot$ s en el escenario e .

3.3 Restricciones

Con el fin de no exceder el límite de páginas establecido, no se muestra la formulación matemática de ciertas restricciones. Sin embargo, se describen las mismas de manera que permita al lector comprender el modelo en su totalidad.

Para cada escenario, un barco se descarga durante el $slot$ s si estaba descargándose durante el $slot$ anterior y todavía no ha finalizado, o si comienza su descarga al inicio del $slot$ actual (1).

$$xb_{b,s,e} = xb_{b,s-1,e} + xid_{b,s,e} - xfd_{b,s-1,e} \quad \forall b \in B, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (1)$$

- Un barco solo puede partir si se encontraba descargando.
- Cada barco debe iniciar y finalizar su descarga dentro del horizonte de planificación.
- Solo un barco puede descargar por vez.
- El número máximo de tanques que se pueden cargar en paralelo es menor o igual a dos.
- Un barco no puede descargar si no hay, al menos, un tanque recibiendo.
- Un tanque puede ser cargado si hay un barco descargando.
- La cantidad de unidades que puede alimentar simultáneamente un mismo tanque es menor o igual a dos.
- El número de tanques que admite en paralelo una misma unidad es menor o igual a tres.
- Cada unidad debe ser alimentada constantemente.
- Cada tanque debe encontrarse en un único estado durante cada $slot$.
- Un tanque debe descargarse si está alimentando a una unidad y viceversa.

- El fin de un slot es igual a su inicio más su duración.
- El inicio de un slot coincide con el fin del slot previo.
- La sumatoria de la duración de todos los slots debe ser igual a la duración del horizonte de planificación.

Se aplica la técnica *big-M* (Winston and Goldberg, 2004) para calcular el volumen de crudo descargado a tanques.

$$fcbq_{c,b,q,s,e} \leq \overline{FQ}_q * ds_s \quad \forall q \in Q, \forall c \in C, \forall (b,c) \in BC, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (2)$$

$$fcbq_{c,b,q,s,e} \geq \underline{FQ}_q * ds_s - M1 * (2 - xb_{b,s,e} - xq_{q,s,e}) \quad \forall q \in Q, \forall c \in C, \forall (b,c) \in BC, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (3)$$

$$fcbq_{c,b,q,s,e} \leq M1 * xb_{b,s,e} \quad \forall q \in Q, \forall c \in C, \forall (b,c) \in BC, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (4)$$

$$fcbq_{c,b,q,s,e} \leq M1 * xq_{q,s,e} \quad \forall q \in Q, \forall c \in C, \forall (b,c) \in BC, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (5)$$

Se calcula el volumen de crudo descargado desde cada barco durante cada *slot* en cada escenario.

$$fcb_{c,b,s,e} \leq \overline{FB}_b * ds_s \quad \forall (b,c) \in BC, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (6)$$

$$fcb_{c,b,s,e} \geq \underline{FB}_b * ds_s - M2 * (1 - xb_{b,s,e}) \quad \forall (b,c) \in BC, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (7)$$

$$fcb_{c,b,s,e} \leq M2 * xb_{b,s,e} \quad \forall (b,c) \in BC, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (8)$$

El volumen de crudo descargado desde un barco durante un *slot* s es igual a la suma de volúmenes descargados en cada tanque.

$$fcb_{c,b,s,e} = \sum_q fcbq_{c,b,q,s,e} \quad \forall (b,c) \in BC, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (9)$$

Volumen total cargado a un tanque durante un *slot* s en el escenario e .

$$fbq_{b,q,s,e} = \sum_{c \in BC} fcbq_{c,b,q,s,e} \quad \forall b \in B, \forall q \in Q, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (10)$$

- Se debe descargar el volumen total de crudo presente en cada barco a lo largo del horizonte.

Se calcula el volumen cargado a cada unidad desde cada tanque.

$$fqu_{q,u,s} \leq \overline{OFQ}_q * ds_s \quad \forall q \in Q, \forall u \in U, \forall s \in S \quad (11)$$

$$fqu_{q,u,s} \geq \underline{OFQ}_q * ds_s - M3 * (1 - y_{q,u,s}) \quad \forall q \in Q, \forall u \in U, \forall s \in S \quad (12)$$

$$fqu_{q,u,s} \leq M3 * y_{q,u,s} \quad \forall q \in Q, \forall u \in U, \forall s \in S \quad (13)$$

El volumen cargado desde un tanque es igual a la sumatoria de volúmenes cargados de cada crudo. Debe tenerse en cuenta que el volumen total no depende de los escenarios (variable de primera etapa). Sin embargo, su composición sí depende ya que el perfil de inventario de cada tanque puede variar entre escenarios al recibir crudos en diferentes fechas.

$$fqu_{q,u,s} = \sum_c fcqu_{c,q,u,s,e} \quad \forall q \in Q, \forall u \in U, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (14)$$

Se calcula el volumen total entregado a cada unidad durante cada *slot*.

$$fu_{u,s} = \sum_q fqu_{q,u,s} \quad \forall u \in U, \forall s \in S \quad (15)$$

$$fu_{u,s} \leq \overline{FU}_u * ds_s \quad \forall u \in U, \forall s \in S \quad (16)$$

$$fu_{u,s} \geq \underline{FU}_u * ds_s \quad \forall u \in U, \forall s \in S \quad (17)$$

Cumplimiento de especificaciones en las mezclas de alimentación a las unidades.

$$\sum_q \sum_c fcqu_{c,q,u,s,e} * PR_{c,k} \leq \overline{PROP}_{u,k} * fu_{u,s} \quad \forall k \in K, \forall u \in U, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (18)$$

$$\sum_q \sum_c fcqu_{c,q,u,s,e} * PR_{c,k} \geq \underline{PROP}_{u,k} * fu_{u,s} \quad \forall k \in K, \forall u \in U, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (19)$$

Volumen de crudo c en cada tanque al inicio de cada *slot*, en cada escenario.

$$ic_{q,c,s,e} = ic_{q,c,s-1,e} + \sum_{b \in BC} fcbq_{c,b,q,s-1,e} - \sum_u fcqu_{c,q,u,s-1,e} \quad \forall q \in Q, \forall c \in C, \forall s \in S \setminus \{s1\}, \forall e \in E \quad (20)$$

Volumen de crudo c en cada tanque al inicio del horizonte.

$$ic_{q,c,s,e} = IIC_{q,c} \quad \forall q \in Q, \forall c \in C, s = s1, \forall e \in E \quad (21)$$

Volumen de crudo c en cada tanque al final del horizonte.

$$ice_{q,c,s,e} = ic_{q,c,s,e} + \sum_{b \in BC} fcbq_{c,b,q,s,e} - \sum_u fcqu_{c,q,u,s,e} \quad \forall q \in Q, \forall c \in C, s = |S|, \forall e \in E \quad (22)$$

Volumen total en cada tanque al inicio de cada *slot* y al final del horizonte.

$$i_{q,s,e} = i_{q,s-1,e} + \sum_b fbq_{b,q,s-1,e} - \sum_u fqu_{q,u,s-1} \quad \forall q \in Q, \forall s \in S \setminus \{s1\}, \forall e \in E \quad (23)$$

$$ie_{q,s,e} = i_{q,s,e} + \sum_b fbq_{b,q,s,e} - \sum_u fqu_{q,u,s} \quad \forall q \in Q, s = |S|, \forall e \in E \quad (24)$$

$$i_{q,s,e} = \sum_c ic_{q,c,s,e} \quad \forall q \in Q, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (25)$$

$$ie_{q,s,e} = \sum_c ice_{q,c,s,e} \quad \forall q \in Q, s = |S|, \forall e \in E \quad (26)$$

- Volumen máximo y mínimo admitido en tanques.

Tiempo mínimo de reposo luego de recibir una carga.

$$is_{sbis} - ts_s \geq ST * (xq_{q,s,e} + yq_{q,sbis} - 1) \quad \forall q \in Q, \forall s \in S, \forall sbis \in S, s < sbis, \forall e \in E \quad (27)$$

Se calcula la diferencia entre volumen procesado y demanda requerida por cada unidad.

$$op_u \geq \sum_s fu_{u,s} - dem_u \quad \forall u \in U \quad (28)$$

$$sp_u \geq dem_u - \sum_s fu_{u,s} \quad \forall u \in U \quad (29)$$

Un barco no puede iniciar su descarga antes de su llegada.

$$is_s \geq AT_{b,e} * xid_{b,s,e} \quad \forall b \in B, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (30)$$

Se calcula la espera como el tiempo transcurrido entre el arribo de un barco y el inicio de su descarga.

$$dmgs_{b,s,e} \geq is_s - AT_{b,e} * xid_{b,s,e} - H * (1 - xid_{b,s,e}) \quad \forall b \in B, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (31)$$

$$dmg_{b,e} = \sum_s dmgs_{b,s,e} \quad \forall b \in B, \forall e \in E \quad (32)$$

La variable $dep_{b,s,e}$ representa la fecha de partida de cada barco para cada escenario. Si un barco continúa descargando

luego de su fecha de partida esperada $EDT_{b,e}$, entonces incurrir en tardanza y la variable $tdn_{b,e}$ toma valor positivo.

$$ts_s \leq dep_{b,s,e} + H * (1 - xfd_{b,s,e})$$

$$\forall b \in B, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (36)$$

$$tdns_{b,s,e} \geq dep_{b,s,e} - EDT_{b,e} \quad \forall b \in B, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (37)$$

$$tdn_{b,e} = \sum_s tdns_{b,s,e} \quad \forall b \in B, \forall e \in E \quad (38)$$

La concentración de cada crudo en el volumen de salida de un tanque debe ser igual a la concentración dentro del tanque. Notar que esta restricción es no lineal.

$$i_{q,s,e} * fcqu_{c,q,u,s,e} = ic_{q,c,s,e} * fqu_{q,u,s}$$

$$\forall c \in C, \forall q \in Q, \forall u \in U, \forall s \in S, \forall e \in E \quad (39)$$

Se calcula el costo asociado a cada escenario. La primer sumatoria, costos debido a la diferencia entre volumen procesado y demanda requerida en cada unidad, constituye el costo de primera etapa. La segunda sumatoria, costos por demora o partida tardía, representa el costo de segunda etapa.

$$ze_e = \sum_u (COP_u * op_u + CSP_u * sp_u)$$

$$+ \sum_b (CDMG_b * dmb_{b,e} + CTDN_b * tdn_{b,e}) \quad \forall e \in E \quad (40)$$

Se define la función objetivo, minimizar el costo asociado a la primera etapa y el costo esperado de la segunda etapa, considerando todos los escenarios.

$$MIN \sum_e \pi_e * ze_e \quad (41)$$

4. Gestión del riesgo

Frecuentemente, es importante considerar la distribución de la función de costo (J) y el riesgo de tener valores ubicados en la cola superior.

Existen dos medidas de riesgo populares, Valor en Riesgo (VaR) y Valor en Riesgo Condicional ($CVaR$). Por un lado, VaR con nivel de confianza $1-\alpha$ determina el mínimo valor ω^* tal que la probabilidad de que J adopte un valor (costo) menor a ω^* es mayor a $1-\alpha$. Por otro lado, $CVaR$ con nivel de confianza $1-\alpha$ representa el valor promedio de la cola de la distribución, por encima del valor $VaR_{1-\alpha}$ (Figura 3).

En este artículo, se emplea $CVaR$ debido a que es simple de calcular y consistente ya que si la función objetivo es convexa respecto a las variables de decisión (u), entonces la función $CVaR$ también es convexa.

Se reformula el modelo de programación estocástica de operaciones a partir de la incorporación de las siguientes restricciones.

$$ze_e - var \leq \phi_e \quad \forall e \in E \quad (42)$$

$$cvar = var + (1/\alpha) * (\sum_e \pi_e * \phi_e) \quad (43)$$

Se minimiza la función (44) sujeto a (1)-(40), (42), y (43). El parámetro λ es un coeficiente no negativo que representa la importancia del riesgo, a criterio del usuario, frente al costo promedio (Noyan, 2012).

$$MIN \sum_e \pi_e * ze_e + \lambda * cvar \quad (44)$$

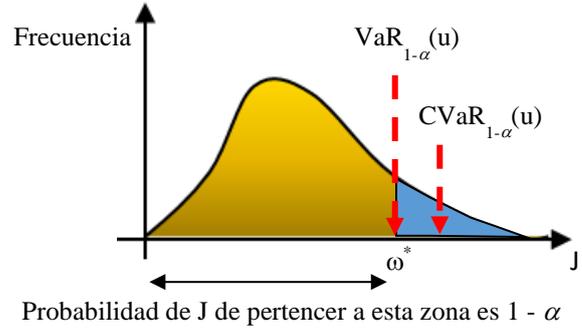


Figura 3: Representación gráfica de CVaR

5. Estrategia de solución

La estrategia de solución para el modelo $MINLP$ consiste en dos etapas. Primero, se resuelve un modelo $MILP$ que es una aproximación del $MINLP$ original. Luego, se fijan los valores de las variables binarias en el $MINLP$ según la solución obtenida para el $MILP$, y se resuelve el modelo no lineal (NLP) resultante. En caso de no obtener una solución factible, se resuelve el $MINLP$ utilizando el solver $DICOPT$.

La formulación del modelo $MILP$ se obtiene al reemplazar la restricción no lineal (39) con las restricciones lineales (45) y (46), las cuales establecen que la salida de un tanque mantiene su composición inicial hasta el momento en que recibe una carga.

$$fcqu_{c,q,u,s,e} \leq CONC_{q,c} * fqu_{q,u,s} + M4 * \sum_{s' \leq s} xq_{q,s',e} \quad (45)$$

$$fcqu_{c,q,u,s,e} \geq CONC_{q,c} * fqu_{q,u,s} - M4 * \sum_{s' \leq s} xq_{q,s',e} \quad (46)$$

6. Resultados

Se lleva a cabo la resolución de un ejemplo el cual consiste de un horizonte de 120 horas, 5 tanques de almacenamiento, 2 unidades de destilación y 5 clases de crudos caracterizados por una única propiedad. Se espera la llegada de 2 barcos. Las fechas de arribo y probabilidades para cada escenario se detallan en la Tabla 1. La fecha de partida esperada es de sendas 12 horas posteriores a la llegada. La demanda de la unidad 1 es 100.000 m³ y de la unidad 2 es 65.000 m³. El ejemplo ha sido resuelto utilizando el software $GAMS$, $CPLEX$ 32.2.0 para $MILPs$ y $CONOPT$ 4.19 para $NLPs$ en un servidor HPE , $Proliant DL380$ con 2 procesadores y 32 GB RAM.

Tabla 1: Escenarios con tiempos de llegada de barcos y probabilidades de ocurrencia.

Escenarios	Probabilidades	Fecha de llegada (h)	
		Barco 1	Barco 2
1	0.01	10	40
2	0.05	50	40
3	0.01	90	40
4	0.18	10	70
5	0.5	50	70
6	0.18	90	70
7	0.01	10	100
8	0.05	50	100
9	0.01	90	100

Se adoptaron cuatro valores de α y tres de λ . Se resolvieron los 12 casos posibles a partir de la combinación de estos valores. La resolución de cada uno tomó, aproximadamente, 10 minutos. Los resultados se resumen en las tablas 2 y 3.

Tabla 2: Valores *CVaR* para distintos valores de α y λ .

CVaR (x10 ³ \$)	α			
	λ	0.3	0.2	0.1
0	81.4	122.1	244.2	488.4
0.1	54.2	69.3	108.6	159
1	42.5	48.75	55.9	57

Tabla 3: Valores de la función objetivo.

FO (x10 ³ \$)	α			
	λ	0.3	0.2	0.1
0	24.42	24.42	24.42	24.42
0.1	29.84	31.35	35.28	40.32
1	76.04	82.29	96.8	97.53

En las figuras 4 y 5, se muestran los diagramas de Gantt de los barcos, correspondientes a dos casos.

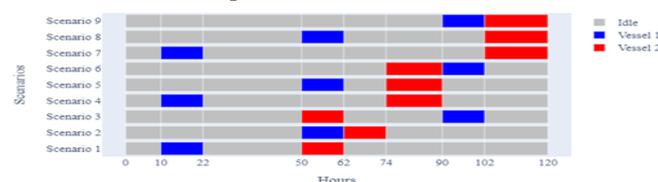


Figura 4: Diagrama de Gantt ($\alpha = 0.3$, $\lambda = 1$)

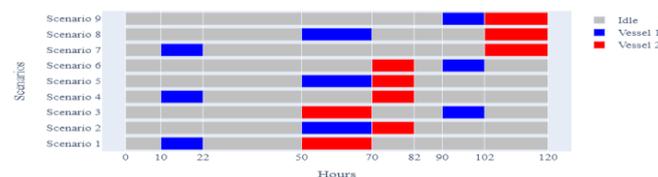


Figura 5: Diagrama de Gantt ($\alpha = 0.3$, $\lambda = 0.1$)

Se analiza cómo los parámetros α y λ afectan a las soluciones. Por un lado, al disminuir α , se adoptan políticas más conservadoras que dan mayor peso a los peores escenarios y, por ende, el valor de la función objetivo aumenta. Por otro lado, incrementar el valor de λ implica un mayor nivel de aversión al riesgo ya que se asigna mayor peso al *CVaR* en la función objetivo. Como sucede con α , el *CVaR* aumenta cuando disminuye λ . Sin embargo, el valor de la función objetivo aumenta a medida que λ toma valores más grandes.

7. Conclusiones

Se ha desarrollado un modelo matemático que representa la operación de una refinera con acceso marítimo. El modelo es utilizado para decidir la mejor manera de operar el área de crudos teniendo en cuenta la incertidumbre asociada a la llegada de barcos. A través de un ejemplo se ha mostrado que formular el problema como uno de optimización estocástica de dos etapas, minimizando el costo esperado y *CVaR*, brinda una forma eficiente de seleccionar las mejores soluciones factibles de acuerdo al nivel de riesgo que el usuario desea asumir.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido realizado parcialmente gracias al apoyo financiero del Gobierno de España a través del proyecto PGC2018-099312-B-C3, de la Agencia Estatal de Investigación en el marco del Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2017-2020, y del Fondo Social Europeo. También se agradece a la empresa Petróleos del Norte S.A.

Referencias

- Birge, J.R. and François Louveaux, 2011. Introduction to stochastic programming. Springer, New York.
- Cao, C., Gu, X. and Xin, Z., 2010. Stochastic chance constrained mixed-integer nonlinear programming models and the solution approaches for refinery short-term crude oil scheduling problem. *Appl. Math. Model.*, 34(11), pp.3231–3243.
- Cerdá, J., Pautasso, P.C. and Cafaro, D.C., 2015. Efficient Approach for Scheduling Crude Oil Operations in Marine-Access Refineries. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 54(33), pp.8219–8238.
- Furman, K.C., Jia, Z. and Ierapetritou, M.G., 2007. A Robust Event-Based Continuous Time Formulation for Tank Transfer Scheduling. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 46(26), pp.9126–9136.
- Gomez Palacin C., Mendez C.A. and De Prada C., 2019. Slots Startup Synchronization with Shared Resources Dependency, *Chemical Engineering Transactions*, 74, pp.1321-1326.
- Gómez Palacín, C., 2020. Efficient scheduling of batch processes in continuous processing lines.
- Jia, Z., Ierapetritou, M. and Kelly, J.D., 2003. Refinery Short-Term Scheduling Using Continuous Time Formulation: Crude-Oil Operations. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 42(13), pp.3085–3097.
- Lee, H., Pinto, J.M., Grossmann, I.E. and Park, S., 1996. Mixed-Integer Linear Programming Model for Refinery Short-Term Scheduling of Crude Oil Unloading with Inventory Management. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 35(5), pp.1630–1641.
- Noyan, N., 2012. Risk-averse two-stage stochastic programming with an application to disaster management. *Comput Oper Res.*, 39(3), pp.541–559.
- Oliveira, F., Nunes, P.M., Blajberg, R. and Hamacher, S., 2016. A framework for crude oil scheduling in an integrated terminal-refinery system under supply uncertainty. *Eur. J. Oper. Res.*, 252(2), pp.635–645.
- Pinto, J.M., Joly, M. and Moro, L.F.L., 2000. Planning and scheduling models for refinery operations. *Comput Chem Eng.*, 24(9-10), pp.2259–2276.
- Reddy, P.Chandra.P., Karimi, I.A. and Srinivasan, R., 2004. A new continuous-time formulation for scheduling crude oil operations. *Chem. Eng. Sci.*, 59(6), pp.1325–1341.
- Wang, J. and Rong, G., 2010. Robust Optimization Model for Crude Oil Scheduling under Uncertainty. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 49(4), pp.1737–1748.
- Winston, W.L. and Goldberg, J.B., 2004 *Operations Research: Applications and Algorithms*. 4th Edition, Cengage Learning, Belmont.

Estrategias avanzadas de control predictivo aplicadas a sistemas solares térmicos

Igor M. L. Pataro^{*a}, Juan D. Gil^a, José L. Guzmán^a, Manuel Berenguel^a

^aCentro Mixto CIESOL, ceiA3, Universidad de Almería. Ctra. Sacramento s/n, Almería 04120, Spain

Resumen

La necesidad de optimizar y ampliar la capacidad de producción de las centrales termosolares sigue siendo un reto desde el punto de vista de la ingeniería de control. Este trabajo propone nuevas soluciones basadas en estrategias de control predictivo con el fin de mejorar el rendimiento de los sistemas de generación de energía solar térmica, centrándose no solo en el control de los campos de captadores solares, sino también en un mejor rendimiento de la totalidad de los subsistemas conectados. Así, este artículo resume los siguientes resultados: i) desarrollo de un controlador híbrido no lineal, y, ii) estudios preliminares de un controlador con garantía de estabilidad nominal y con compensación por adelanto. Se muestran resultados de simulación sobre un modelo no lineal de la planta solar ubicada en el Centro de Investigación en Energía Solar (CIESOL) de la Universidad de Almería. Como resultado, la estrategia de control híbrido no lineal reduce el error de seguimiento de referencia en comparación con una estrategia no híbrida. Por otro lado, la propuesta de controlador con garantía de estabilidad ha mantenido el control siempre estable en lazo cerrado y presenta mejor desempeño para el rechazo de perturbaciones en comparación con el controlador de horizonte infinito convencional.

Palabras clave: Planta solar, Control predictivo, Control híbrido, MPC estable, Feedforward

1. Introduction

La energía solar se ha perfilado como una de las opciones más importantes y prometedoras para sustituir las fuentes de energía derivadas de los combustibles fósiles, tanto para la producción de electricidad como para el suministro de energía térmica. Aunque la utilización de energía solar térmica haya crecido en los últimos años, aún existe la preocupación de que sea económicamente viable (Buchmayr et al., 2021; Petela and Szlek, 2019; Camacho et al., 2012). Por ello, la ingeniería de control ha demostrado ser un campo fiable y relevante permitiendo la mejora del rendimiento de las plantas termosolares. Las estrategias de control avanzadas, principalmente aquellas relacionadas con los enfoques de control no lineal y rechazo de perturbaciones, contribuyen a la reducción de costes y aumento de las horas de operación de las plantas termosolares (de Araújo Elias et al., 2019; Bordons et al., 2020).

La mejora en el rendimiento de las plantas termosolares está generalmente ligada al control preciso de la temperatura de salida del fluido caloportador (*Heat Transfer Fluid* - HTF por sus siglas en inglés) del campo de captadores solares. Sin embargo, considerar la asociación de subsistemas auxiliares, como tanques de almacenamiento y calentadores a gas, es fundamental para el control de estas plantas. Estos subsistemas ayudan a mejorar la eficiencia general de la planta mediante el filtrado de perturbaciones indeseables que pueden reducir la temperatura de salida del HTF o el aumento de la temperatura si la radiación solar es insuficiente. Por lo tanto, como se puede observar, el empleo de estrategias de control avanzadas debe considerar diferentes efectos de perturbaciones y, también, de varios subsistemas acoplados con el campo de captador solar.

En base a los problemas de control mencionados anteriormente, este trabajo resume los resultados obtenidos en el desarrollo de estrategias avanzadas de control predictivo con aplicación a plantas termosolares. En primer lugar, se presenta un nuevo algoritmo de control basado en una versión extendida de un Control Predictivo basado en Modelo No Lineal Práctico (*Practical Nonlinear Model Predictive Control* - PNMPC, por sus siglas en inglés), en el que se emplea una novedosa formulación híbrida para garantizar acciones de control óptimas respecto a las condiciones de variables continuas y binarias del sistema (Pataro et al., 2022). Posteriormente, se desarrolla un controlador predictivo de horizonte infinito con garantía de estabilidad (*Infinite Horizon MPC* - IHMPC, por sus siglas en inglés) con compensación de adelanto implícita (*Feedforward* - FF, por sus siglas en inglés) para controlar el campo de captador solar rechazando los efectos variables de perturbaciones como la irradiancia y, las temperaturas de entrada y ambiente (Pataro et al., 2021).

Este documento se divide de la siguiente manera: en la Sección 2 se resume la formulación del controlador Híbrido PNMPC (HPNMPC). La Sección 3 describe el algoritmo IHMPC-FF y la formulación del problema de optimización. En la Sección 4, se presentan los principales resultados de ambos controladores propuestos. Finalmente, en la Sección 5 se examinan las conclusiones y las consideraciones finales.

2. Un enfoque de control híbrido no lineal para campos solares térmicos

El PNMPC Híbrido está formulado como una extensión de la estrategia de control original presentada en el trabajo de Plucenio et al. (2007). Esta estrategia calcula las salidas del sistema no lineal a lo largo de un horizonte de predicción N_p , como una

* Autor para la correspondencia: ilp428@inlumine.ual.es

función lineal aproximada de los futuros incrementos de control Δu . El vector de salidas predichas \hat{Y} es una función lineal aproximada considerando el vector de respuesta libre F y la matriz de respuesta forzada G , en la que G se calcula como el gradiente del vector de respuesta libre para los incrementos de entrada Δu , $G = \frac{\partial \hat{Y}}{\partial \Delta u}$. Como se describe en el trabajo de Pataro et al. (2022), el problema de optimización de control HPNMPC tiene en cuenta los modos operativos de la planta como restricciones del proceso, produciendo un problema Lógico-Dinámico Mixto (*Mixed Logical Dynamic* - MLD, por sus siglas en inglés) que incluye variables binarias y continuas. Así, la planta solar térmica está representada por cada ecuación no lineal del subsistema y la configuración correspondiente de la planta definida por variables binarias.

La planta solar térmica ubicada en el centro CIESOL se utiliza como caso de estudio para el presente trabajo. La planta CIESOL utiliza el campo de captadores solares térmicos de placa plana, Fig. 1, para generar agua caliente asociada a depósitos de acumulación y un calentador de gas. Estos tres subsistemas deben proporcionar agua caliente a un sistema de carga. En este trabajo, debido al período de pruebas y datos recopilados, se implementa la estrategia de control en la planta CIESOL operando en modo Invierno, utilizando así el intercambiador de calor como sistema de demanda de carga. Sin embargo, esta elección no afecta la esencia de los resultados ya que las condiciones de operación pueden adaptarse fácilmente de acuerdo con el sistema de carga definido, cambiando la temperatura de referencia o el rango de referencia, por ejemplo.



Figura 1: captadores solar de la instalación CIESOL

La Fig. 2 ilustra el circuito primario de la instalación de CIESOL y sus variables controladas y manipuladas (ver (Pataro et al., 2022) para descripciones detalladas del modelo y las variables). El objetivo del sistema es proporcionar la energía térmica necesaria para el circuito secundario, aquí representado como el intercambiador de calor. Como se puede observar, dependiendo del modo de configuración del sistema, el HTF puede pasar por diferentes equipos del subsistema, lo que altera la evolución de las variables dinámicas y por lo tanto, la predicción de cada variable de temperatura. Como consecuencia, considerando los cambios de modo de operación de la planta de CIESOL, se propone la siguiente ecuación de predicción para el HPNMPC:

$$\hat{Y} = F_{m_{k-1}} + G_M \cdot \Delta z \quad (1)$$

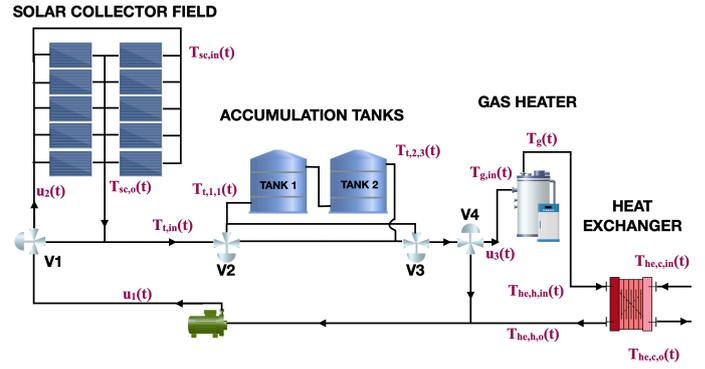


Figura 2: Instalación planta solar térmica CIESOL (Pataro et al., 2022)

asumiendo que

$$G_M = [G_1, G_2, \dots, G_{n_m}]_{[N_p \cdot n_y \times N_c \cdot n_u \cdot n_m]},$$

$$\Delta z = [\Delta z_1, \Delta z_2, \dots, \Delta z_{n_m}]_{[N_c \cdot n_u \cdot n_m \times 1]}$$

en la que la notación m_{k-1} representa el modo de operación de planta en el instante $k-1$, m está relacionado con el número de modos de operación, es decir $m = 1, \dots, n_m$, N_c es el horizonte de control, n_y es el número de salidas y n_u es el número de entradas. Además, se introduce una variable auxiliar Δz_m , que relaciona las variables manipuladas del sistema con el modo de operación como $\Delta z_m = \delta_m \cdot \Delta u$. En esta expresión, δ_m es la variable encargada de definir el modo de operación, mientras que Δu representa las variables manipuladas por el sistema, es decir $\Delta u = [\Delta u_1, \dots, \Delta u_{n_u}]$. Las salidas y entradas de HPNMPC se definen como (ver Fig. 2):

$$\hat{Y} = [\hat{T}_{sc,o}, \hat{T}_{p1}, \hat{T}_{t,1,1}, \hat{T}_{t,1,2}, \hat{T}_{t,1,3}, \hat{T}_{t,2,1}, \dots, \hat{T}_{t,2,2}, \hat{T}_{t,2,3}, \hat{T}_g, \hat{T}_{he,h,o}, \hat{T}_{he,c,o}, \hat{T}_{p2}]^T$$

$$\Delta u = [\Delta u_1, \Delta u_2, \Delta u_3]^T$$

Los modos de funcionamiento se definen como una combinación de diferentes condiciones del proceso. En primer lugar, se consideran las cuatro variables binarias auxiliares: δ_{T1} , δ_{T2} , δ_{GH} y δ_{mode} . Estas variables representan las condiciones en las que se puede activar/desactivar cada subsistema. Para operar los tanques en el modo de descarga, $\delta_{T1} = 1$. Por otro lado, para operar los tanques en modo carga $\delta_{T2} = 1$ y cuando ambas variables $\delta_{T1} = \delta_{T2} = 0$, los tanques dejan de formar parte de la configuración de la planta. Además, para activar el calentador de gas, $\delta_{GH} = 1$. Finalmente, δ_{mode} es la variable auxiliar que mantiene el sistema en modo operativo por un tiempo determinado. Por lo tanto, los modos de operación de CIESOL se traducen en variables binarias, como se define en la Tabla 1. Para cada cambio de modo de operación se puede definir una condición operativa diseñada. En el trabajo de Pataro et al. (2022), las condiciones de operación de CIESOL se describen y formulan como desigualdades enteras mixtas (ver (Bemporad and Morari, 1999; Williams, 2013) para informaciones adicionales).

Por lo tanto, con base en el modelado de sistemas, las predicciones de salida y la formulación de restricciones, el problema de optimización del HPNMPC se da de la siguiente manera (Pataro et al., 2022):

Tabla 1: Tabla de la verdad de las variables auxiliares y modos de operación. *La notación X representa la irrelevancia lógica de la variable para la salida en modo binario, que puede ser 1 o 0. El operador \wedge representa la operación lógica “AND” y la notación δ la operación lógica “NOT”.

Modo Binario	δ_{T1}	δ_{T2}	δ_{GH}	δ_{mode}	Salida
δ_1	0	0	0	1	$= \delta_{T1} \wedge \delta_{T2} \wedge \delta_{GH} \wedge \delta_{mode}$
δ_2	1	0	0	1	$= \delta_{T1} \wedge \delta_{T2} \wedge \delta_{GH} \wedge \delta_{mode}$
δ_3	0	1	0	1	$= \delta_{T1} \wedge \delta_{T2} \wedge \delta_{GH} \wedge \delta_{mode}$
δ_3	1	1	0	1	$= \delta_{T1} \wedge \delta_{T2} \wedge \delta_{GH} \wedge \delta_{mode}$
δ_4	0	0	1	1	$= \delta_{T1} \wedge \delta_{T2} \wedge \delta_{GH} \wedge \delta_{mode}$
δ_5	1	0	1	1	$= \delta_{T1} \wedge \delta_{T2} \wedge \delta_{GH} \wedge \delta_{mode}$
δ_6	0	1	1	1	$= \delta_{T1} \wedge \delta_{T2} \wedge \delta_{GH} \wedge \delta_{mode}$
δ_6	1	1	1	1	$= \delta_{T1} \wedge \delta_{T2} \wedge \delta_{GH} \wedge \delta_{mode}$
δ_{mk-1}	X	X	X	0	$= \delta_{mode}$

Problema 1:

$$\min_{\Delta z(t), \delta_p(t), T_{ref}(t)} J_{HPNMPC},$$

$$J_{HPNMPC} = \sum_{i=1}^{i=N_p} |\hat{T}_g(t+i|t) - T_{ref}(t+i|t)|_{\mathbf{R}}^2 + \sum_{m=1}^{m=n_m} \sum_{j=0}^{j=N_c-1} |\Delta z_m(t+j|t)|_{\mathbf{Q}_z}^2 \quad (2)$$

sujeto a, $\forall i = 1, \dots, N_p$ and $\forall j = 0, \dots, N_c - 1$

$$\delta_p(t) \quad \forall p = \{m \in [1, \dots, n_m], T_1, T_2, GH_1, GH_2, GH, mode\} \quad (3a)$$

$$u(t) = \Delta u(t|t) + u(t-1) \quad (3b)$$

$$\Delta u_{i_{min}} \leq \Delta u_i(t+j|t) \leq \Delta u_{i_{max}}, \quad \forall i = 1, \dots, 3 \quad (3c)$$

$$u_{i_{min}} \leq u_i(t+j|t) \leq u_{i_{max}}, \quad \forall i = 1, \dots, 3 \quad (3d)$$

$$T_{sc,o_{min}} \leq \hat{T}_{sc,o}(t+i|t) \leq T_{sc,o_{max}} \quad (3e)$$

$$T_{ref_{min}} \leq T_{ref}(t+i|t) \leq T_{ref_{max}} \quad (3f)$$

$$(3g)$$

donde \mathbf{Q}_z y \mathbf{R} son los factores de ponderación para las entradas y salidas, respectivamente. Observe que \mathbf{Q}_z es una matriz de ponderación cuadrada de dimensión $[n_u \cdot n_m \times n_u \cdot n_m]$, para n_m el número de modos operativos.

3. IHMPC con garantía de estabilidad y compensación por adelanto

Considere un modelo de espacio de estado parametrizado con variables de perturbación (Rodrigues and Odloak, 2003; Pataro et al., 2021):

$$\begin{bmatrix} \mathbf{x}^i(k+1) \\ \mathbf{x}^s(k+1) \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{I}_{n_y} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{F} \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \begin{bmatrix} \mathbf{x}^i(k) \\ \mathbf{x}^s(k) \end{bmatrix} + \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{B}^i \\ \mathbf{B}^s \end{bmatrix}}_{\mathbf{B}} \Delta \mathbf{u}(k) + \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{D}^i \\ \mathbf{D}^s \end{bmatrix}}_{\mathbf{D}} \Delta \mathbf{d}(k), \quad (4)$$

$$\mathbf{y}(k) = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{I}_{n_y} & \mathbf{\Psi} \end{bmatrix}}_{\mathbf{C}} \begin{bmatrix} \mathbf{x}^i(k) \\ \mathbf{x}^s(k) \end{bmatrix}, \quad (5)$$

donde los estados del modelo \mathbf{x}^i y \mathbf{x}^s son, respectivamente, los estados integradores artificiales, logrados mediante la formulación incremental de las entradas del modelo, y los estados estables, que se originan a partir de la polos estables del sistema. Las matrices \mathbf{F} y $\mathbf{\Psi}$ están asociadas con el tiempo de muestreo y de la respuesta libre del sistema, y las salidas del sistema, respectivamente. Las matrices de coeficientes \mathbf{B}^i y \mathbf{B}^s se originan a partir de la expansión en fracciones parciales de la función de transferencia del sistema para el resultado de las variables manipuladas incrementales $\Delta \mathbf{u}$, \mathbf{D}^i y \mathbf{D}^s para el resultado de las perturbaciones medidas $\Delta \mathbf{d}$. Para obtener una explicación más detallada sobre la representación del modelo, consulte (Pataro et al., 2021).

Considerando el modelo presentado descrito en las Ecs. 4 y 5, y la formulación de IHMPC con variables de holgura (Rodrigues and Odloak, 2003), el control predictivo de horizonte infinito se formula de la siguiente manera:

Problema 2:

$$\min_{\Delta \mathbf{u}_k, \delta_{y,k}} J_{k,2},$$

en que:

$$J_{k,2} = \sum_{j=1}^{\infty} \|\mathbf{y}(k+j|k) - \mathbf{y}_{sp} - \delta_{y,k}\|_{\mathbf{Q}_y}^2 + \sum_{j=0}^{m-1} \|\Delta \mathbf{u}(k+j|k)\|_{\mathbf{R}}^2 + \|\delta_{y,k}\|_{\mathbf{S}_y}^2 \quad (6)$$

sujeto a:

$$U = \begin{cases} \Delta \mathbf{u}_{min} \leq \Delta \mathbf{u}(k+j|k) \leq \Delta \mathbf{u}_{max}, \\ \Delta \mathbf{u}(k+j|k) = 0, \quad j > m, \\ \mathbf{u}_{min} \leq \mathbf{u}(k+j|k) \leq \mathbf{u}_{max}, \end{cases} \quad (7)$$

$$\mathbf{x}^i(k|k) + \mathbf{B}_m^i \Delta \mathbf{u}_k - \mathbf{y}_{sp} - \delta_{y,k} = 0 \quad (8)$$

siendo

$$\Delta \mathbf{u}_k = [\Delta \mathbf{u}(k|k)^\top \Delta \mathbf{u}(k+1|k)^\top \dots \Delta \mathbf{u}(k+m-1|k)^\top]^\top,$$

$$\Delta \mathbf{d}_k = [\Delta \mathbf{d}(k|k)^\top \Delta \mathbf{d}(k+1|k)^\top \dots \Delta \mathbf{d}(k+m-1|k)^\top]^\top,$$

\mathbf{y}_{sp} es el vector de referencia de salida y m es el horizonte de control. Observe que la variable de holgura $\delta_{y,k}$ se introduce para suavizar la restricción terminal en la Ec. 8, aumentando el dominio de atracción y haciendo siempre factible la solución del problema de optimización. Las matrices \mathbf{Q}_y , \mathbf{R} y \mathbf{S}_y son las matrices de ponderación utilizadas como parámetros de ajuste del controlador, en las que \mathbf{S}_y se elige con valores altos para forzar el uso de variables de holgura solo cuando sea necesario.

La estabilidad nominal garantizada se logra siguiendo la solución recursiva y la disminución asintótica de los conceptos de función de costo (Rodrigues and Odloak, 2003) y esta descrita detalladamente en (Pataro et al., 2021). Con base en esta formulación, se muestra que el IHMPC con la estrategia FF puede mejorar el rendimiento del control al rechazar con precisión las perturbaciones y mantener las características de estabilidad nominal, lo que conduce a la convergencia del sistema de bucle cerrado tanto para el seguimiento de referencia como para los escenarios de perturbaciones medidas. Este enfoque trae resultados convincentes con respecto al control del campo de captadores solares, que se caracteriza principalmente por un sistema multiperturbado.

4. Resultados relevantes obtenidos

Siguiendo los enfoques de control desarrollados y utilizando la instalación CIESOL para ejemplificar la implementación del HPNMPC y el IHMPC+FF, los resultados obtenidos de ambos controladores predictivos se describen a continuación.

4.1. Resultados principales de HPNMPC

El HPNMPC se implementó en un ambiente simulado, considerando un caso de día sin nubes (Escenario 1) y un día nublado (Escenario 2). Además, la estrategia propuesta se compara con la estrategia PNMPC clásica, en la que se utiliza una estructura de control externa para definir el modo de funcionamiento en función de las mismas condiciones operativas formuladas en el algoritmo HPNMPC. Tanto el ajuste de control para el PNMPC clásico como para el HPNMPC y además las condiciones del proceso son detalladas en (Pataro et al., 2022).

Los resultados representados en la Fig. 3 demuestran que el HPNMPC puede eliminar el uso de la estructura clásica externa de toma de decisiones y proporcionar los modos operativos adecuados para la configuración del sistema. Además, dado que el HPNMPC incluye el cálculo de los modos de la planta a lo largo del horizonte de predicción, este enfoque se compara con un controlador con una estructura externa. Esta ligera diferencia puede cambiar toda la operación de la planta a lo largo del día, ya que las combinaciones de sistemas pueden alterar significativamente los perfiles de temperatura. Sin embargo, al comparar el desempeño de ambas estrategias, el HPNMPC tiene un mejor desempeño de control con respecto al error de seguimiento de referencia (Pataro et al., 2022). El HPNMPC presenta un enfoque atractivo para minimizar los costos computacionales y, además, dado que convierte restricciones lógicas en desigualdades lógicas mixtas, el controlador puede usar solucionadores más simples, lo que proporcionan un tiempo de procesamiento más corto.

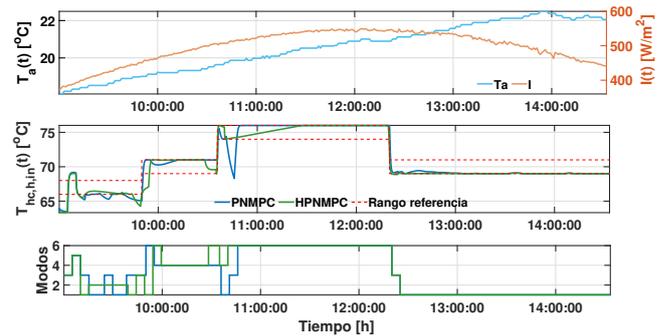
4.2. Resultados principales del IHMPC+FF

El IHMPC+FF se probó en simulación para controlar el sistema de captadores solares, con el objetivo de demostrar su desempeño. La formulación del controlador está diseñada de acuerdo al problema de optimización propuesto en el **Problema 2**. Por lo tanto, con el objetivo de comparar el rendimiento, el IHMPC+FF es comparado con el IHMPC sin compensaciones de perturbaciones. La Fig. 4 representa las salidas IHMPC e IHMPC+FF con los respectivos cambios de entrada.

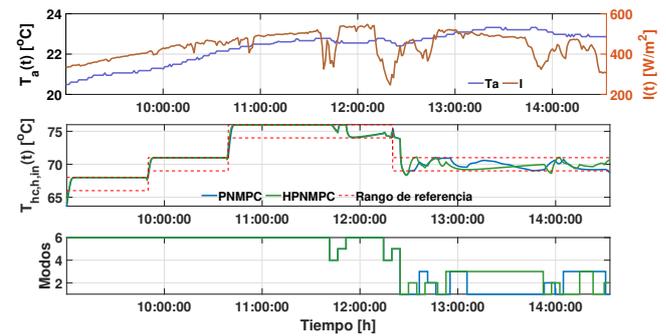
Además, las Figs. 5a y 5b representan las variables de holgura y los valores de la función de costo para el IHMPC+FF e el IHMPC. Observase que el parámetro de ajuste de control S_y garantiza que las holguras se utilicen solo cuando sea necesario, poniéndose a cero en un régimen de estado estable. Además, la función de costo decrece asintóticamente, respetando las propiedades de estabilidad en lazo cerrado.

5. Consideraciones finales

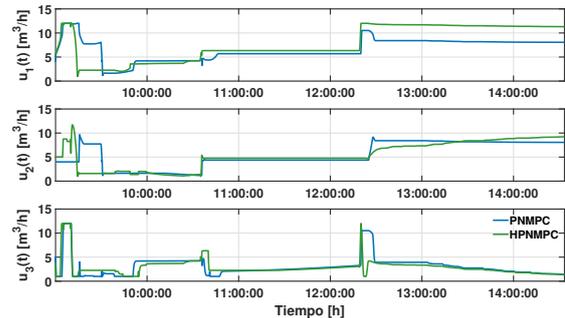
Este trabajo presenta los resultados obtenidos en el desarrollo de estrategias avanzadas de control predictivo para el control de sistemas solares térmicos. Se investigan los resultados logrados con las estrategias HPNMPC e IHMPC+FF para el control de la



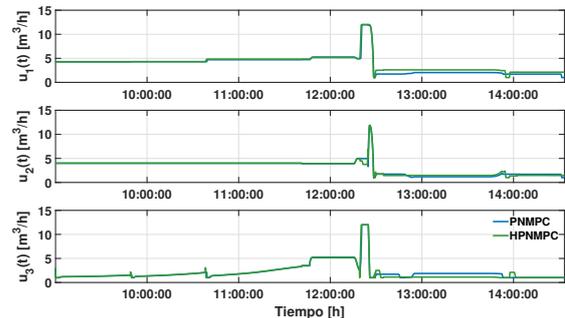
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 3: (a) Perturbaciones y salidas del Escenario 1, (b) Perturbaciones y salidas del Escenario 2, (c) Entradas del Escenario 1, (d) Entradas del Escenario 2 para el HPNMPC y el PNMPC clásico.

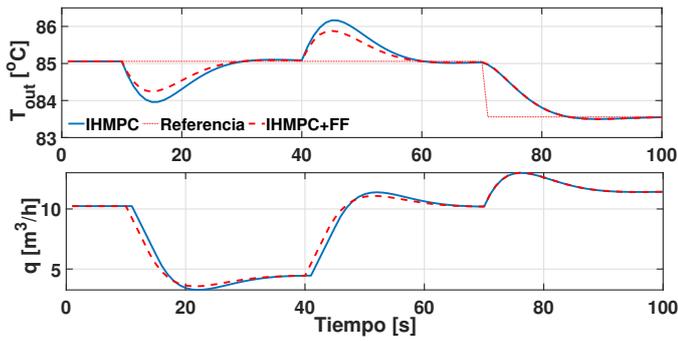


Figura 4: Temperatura de salida ($T_{out}(t)$) y caudal de entrada ($q(t)$) del sistema para los controladores IHMPC+FF e IHMPC.

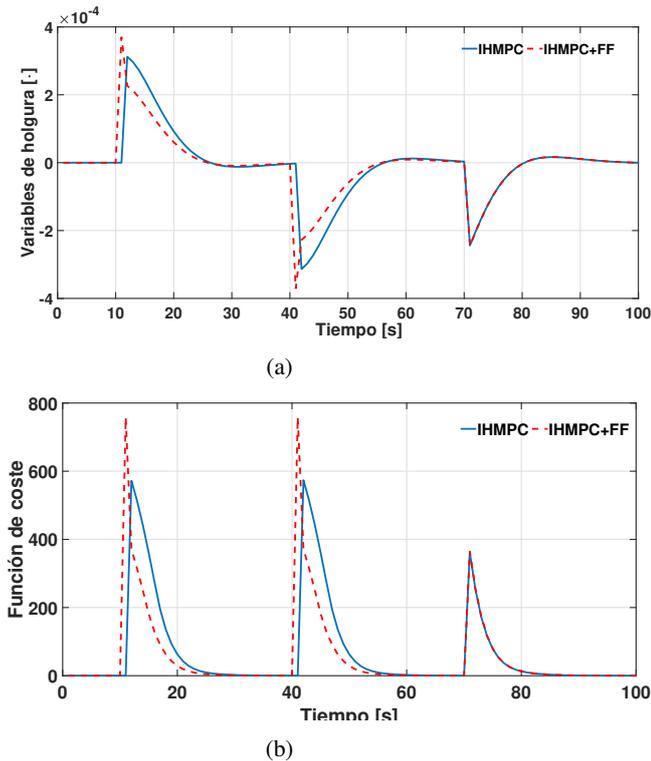


Figura 5: (a) Variables de holgura de los controladores IHMPC+FF e IHMPC. y (b) valores de la función de costo de los controladores IHMPC+FF e IHMPC.

instalación CIESOL y sus subsistemas en un ambiente simulado validado.

En primer lugar, cabe destacar que ambas estrategias tienen un gran potencial para ser implementadas en el escenario real ya que su formulación demostró un buen compromiso entre el esfuerzo computacional y el rendimiento del control. Con respecto al HPN MPC, los modelos híbridos y las condiciones de operación del proceso se formulan en un problema de optimización de una sola capa, lo que da como resultado las acciones de control óptimas y puede también facilitar la predicción de los modos de operación futuros al largo del horizonte de control. Esta condición ofrece oportunidades atractivas para desarrollar capas de optimización considerando maximizar la generación total de energía solar térmica.

En lo que respecta al IHMPC+FF, la formulación de control presenta una garantía de estabilidad nominal en lazo cerrado

para procesos con polos estables y perturbación medida. Además, comparando el IHMPC+FF con el IHMPC, la estrategia propuesta con acción FF implícita puede mejorar el rendimiento del control al rechazar las perturbaciones del proceso al mismo tiempo que mantiene las propiedades de estabilidad de lazo cerrado.

Los trabajos futuros están destinados a mejorar estos resultados. Ambas estrategias deben ser evaluadas bajo escenarios de estimación de perturbaciones, lo que puede ayudar a mejorar la predicción de salida, considerando principalmente las variables de irradiancia solar y temperatura ambiente. Además, la implementación real motiva la investigación en curso para evaluar el desempeño de las estrategias propuestas considerando la interferencia de diversas incertidumbres.

Agradecimientos

El autor agradece el soporte económico del *Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico* (CNPq, Brasil) que ha financiado parte de este trabajo bajo la beca con código 201143/2019 – 4.

Referencias

- de Araújo Elias, T., Mendes, P.R.C., Normey-Rico, J.E., 2019. Mixed logical dynamical nonlinear model predictive controller for large-scale solar fields. *Asian Journal of Control* 21, 1881–1891. doi:<https://doi.org/10.1002/asjc.1967>.
- Bemporad, A., Morari, M., 1999. Control of systems integrating logic, dynamics, and constraints. *Automatica* 35, 407–427. doi:[https://doi.org/10.1016/S0005-1098\(98\)00178-2](https://doi.org/10.1016/S0005-1098(98)00178-2).
- Bordons, C., Garcia-Torres, F., Ridao Carlini, M.Á., 2020. Model predictive control of interconnected microgrids and electric vehicles. *Revista Iberoamericana de Automática e Informática industrial* 17, 239–253. doi:[10.4995/riai.2020.13304](https://doi.org/10.4995/riai.2020.13304).
- Buchmayr, A., Verhofstadt, E., Van Ootegem, L., Sanjuan Delmás, D., Thomassen, G., Dewulf, J., 2021. The path to sustainable energy supply systems: Proposal of an integrative sustainability assessment framework. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 138, 110666. doi:<https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110666>.
- Camacho, E.F., Berenguel, M., Rubio, F.R., Martínez, D., 2012. *Control of Solar Energy Systems*. Springer, London, England.
- Pataro, I.M.L., Gil, J.D., Americano da Costa, M.V., Guzmán, J.L., Berenguel, M., 2021. Development of a predictive controller with advance compensation and stability guarantee: preliminary results (in Spanish). *XLII Conference on Automatic: minutes book*. chapter 1. pp. 294–300. doi:<https://doi.org/10.17979/spudc.9788497498043.294>.
- Pataro, I.M.L., Gil, J.D., Americano da Costa, M.V., Guzmán, J.L., Berenguel, M., 2022. A nonlinear control approach for hybrid solar thermal plants based on operational conditions. *Renewable Energy* 183, 114–129. doi:<https://doi.org/10.1016/j.renene.2021.10.057>.
- Petela, K., Szlek, A., 2019. Control algorithm for an advanced hybrid heating and cooling node – analysis of its potential. *Energy Conversion and Management* 201, 112087. doi:<https://doi.org/10.1016/j.enconman.2019.112087>.
- Plucenio, A., Pagano, D., Bruciapaglia, A., Normey-Rico, J.E., 2007. A practical approach to predictive control for nonlinear processes. *IFAC Proceedings Volumes* 40, 210–215. doi:<https://doi.org/10.3182/20070822-3-ZA-2920.00035>. 7th IFAC Symposium on Nonlinear Control Systems.

Rodrigues, M.A., Odloak, D., 2003. MPC for stable linear systems with model uncertainty. *Automatica* 39, 569–583. doi:10.1016/S0005-1098(02)00176-0.

Williams, H.P., 2013. *Model Building in Mathematical Programming*. Wiley, New York, U.S.

Descomposición de Problemas de *Scheduling* de Dos Etapas Usando un Índice de Similitud

Daniel Montes^{*a}, José Luis Pitarch^b, César de Prada^{a,c}

^aDepartamento de Ingeniería de Sistemas y Automática, Universidad de Valladolid, C/ Dr. Mergelina s/n, Valladolid, España

^bInstituto Universitario de Automática e Informática Industrial (ai2), Universitat Politècnica de València, Camino de Vera s/n, Valencia, España

^cInstituto de Procesos Sostenibles, Universidad de Valladolid, C/ Dr. Mergelina s/n, Valladolid, España

Resumen

Las formulaciones de problemas de *scheduling* dos etapas son una forma de tener en cuenta la incertidumbre de algunos parámetros en la toma de decisiones. Sin embargo, estos problemas son de gran dimensión y usualmente implican tiempos de cómputo muy largos que dificultan su implementación en tiempo real en los procesos industriales. Para reducir la carga computacional se han desarrollado distintos métodos de descomposición como el método de Benders, la descomposición dual, *Progressive Hedging*, etc. que descomponen el problema en partes más pequeñas que son más fáciles de resolver y sus soluciones se pueden combinar para obtener una solución del problema original. En este trabajo se presenta un método de descomposición novedoso basado en un índice de similitud que compara las soluciones de cada uno de los subproblemas y que se mejora progresivamente hasta que la similitud sea total. Se prueba la propuesta en un problema de *scheduling* de escala industrial y se compara con la solución tradicional (monolítica). Se obtienen ahorros significativos en el tiempo de cómputo.

1. Introducción

Entre los métodos desarrollados para descomponer los problemas de *scheduling* de dos etapas se destacan el método de Benders, la descomposición dual y el algoritmo de *Progressive Hedging*. En el método de descomposición dual, las restricciones de no-anticipabilidad se relajan y se resuelve el dual del lagrangiano para obtener cotas inferiores del problema original. Por su parte, las cotas superiores se obtienen resolviendo el problema con la solución de la primera etapa fijada. Los multiplicadores de las restricciones de no-anticipabilidad se actualizan en cada iteración hasta que se logra la convergencia (Carøe and Schultz, 1999). En cuanto al algoritmo de *Progressive Hedging*, el procedimiento es similar a la descomposición dual, sin embargo, se usa el Lagrangiano aumentado y se penaliza la desviación de cada subproblema de la solución media. Los multiplicadores se pueden actualizar usando el método del subgradiente y el procedimiento se repite hasta lograr la convergencia (Rockafellar and Wets, 1991). El método de Benders también ha sido usado para descomponer problemas estocásticos de dos etapas. Las variables de primera etapa se fijan de forma tal que la segunda etapa se pueda descomponer. Así se tiene un problema maestro formado únicamente por las variables de primera etapa. Los subproblemas de la segunda etapa tienen las variables de primera etapa fijadas en la solución del problema maestro. A partir de la solución de los subproblemas es posible agregar cortes de optimalidad o factibilidad, dependiendo si son factibles o no, al problema maestro. El procedimiento se repite iterativamente hasta alcanzar la convergencia (Benders, 1962). La solución del problema maestro da una cota inferior de la función objetivo mientras que una solución factible da una cota superior. El criterio de parada es entonces que la diferencia entre estas cotas sea pequeña (Li and Grossmann, 2021).

Sin embargo, estos métodos de descomposición tienen ciertos inconvenientes que dificultan su uso. Algunos pueden presentar oscilaciones en las soluciones (*Progressive Hedging*) o convergencia lenta (descomposición dual). Por su parte, el método de Benders puede requerir gran cantidad de cortes de optimalidad/factibilidad que al final en lugar de reducir los requerimien-

tos computacionales, los aumentan (Rahmaniani et al., 2017). En este trabajo se propone un método alternativo en el que se eliminan las restricciones de no-anticipabilidad del problema. Esto lleva a que se pueda descomponer por escenarios y se usa un índice para evaluar la similitud entre la solución de los subproblemas en el horizonte robusto. Este índice se incorpora en la función objetivo de los subproblemas y se intenta aumentar en cada iteración hasta que la similitud sea máxima (total). Cuando la similitud es total en las variables de primera etapa, el criterio de no-anticipación se cumple y, por tanto, la solución es factible.

El trabajo está estructurado de la siguiente forma: en la sección 2 se presenta el problema general de *scheduling* de dos etapas, en la sección 3 se introduce el índice de similitud y en la sección 4 se propone el algoritmo de descomposición. La sección 5 presenta el caso de estudio del *scheduling* de una planta de evaporación. Finalmente, en la sección 6 se presentan los resultados y se cierra el artículo en la sección 7 con las conclusiones.

2. *Scheduling* de dos etapas

De forma general los problemas de *scheduling* lineales de dos etapas son expresados como aparece en (1) (Grossmann, 2021). Donde x son las decisiones que se deben tomar antes de conocer el verdadero valor de los parámetros inciertos θ . $\bar{Q}(x)$ es el valor esperado de la función de recurso ($\bar{Q}(x) = E_{\theta}\{Q(x, \theta)\}$). La función de recurso $Q(x, \theta)$ es optimizada en términos de las variables de segunda etapa y para cada realización de los valores de los parámetros inciertos θ que siguen cierta función de distribución de probabilidad. La restricción $Ax = b$ representa todas las posibles ecuaciones del modelo. Note que las variables x pueden tomar valores reales o enteros.

$$\begin{aligned} \min_x \quad & c^T x + \bar{Q}(y) \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{aligned} \quad (1)$$

La función de recurso $Q(x, \theta)$ viene dada por (2). Donde la primera restricción corresponde a las ecuaciones del modelo

de la segunda etapa. $Q(x, \theta)$ dependerá únicamente del valor de las variables de primera etapa y del valor de los parámetros inciertos.

$$\begin{aligned} Q(x, \theta) = \min_{y(\theta)} & \quad q(\theta)^T y(\theta) \\ \text{s.t.} & \quad W(\theta)y(\theta) = h(\theta) - T(\theta)x \\ & \quad y(\theta) \geq 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Si los parámetros inciertos siguen una función de distribución de probabilidad discreta y finita, θ_e , $e = 1, \dots, |\mathcal{E}|$, con probabilidades asociadas p_e , el problema de *scheduling* puede reescribirse en la forma equivalente determinista (3). El número de variables al introducir incertidumbre en la formulación aumenta proporcionalmente al número de realizaciones de los parámetros inciertos considerado. Esto implica un aumento muy rápido del tiempo de cómputo dificultando las implementaciones en línea de los modelos de *scheduling*.

$$\begin{aligned} \min_{x, y_e} & \quad c^T x + \sum_{e \in \mathcal{E}} p_e q_e^T y_e \\ \text{s.t.} & \quad Ax = b \\ & \quad T_e x + W_e y_e = h_e, \quad e = 1, \dots, |\mathcal{E}| \\ & \quad x, y_e \geq 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Es común permitir que las variables de primera etapa estén indexadas por escenario, x_e . Para guardar coherencia con (3), se debe agregar un conjunto de restricciones de forma tal que las variables de primera etapa sean iguales para todos los escenarios ($x_1 = x_2 = \dots = x_{|\mathcal{E}|}$). A esta restricción se le conoce como el criterio de no-anticipabilidad. Esto se muestra en (4).

$$\begin{aligned} \min_{x_e, y_e} & \quad \sum_{e \in \mathcal{E}} p_e (c^T x_e + q_e^T y_e) \\ \text{s.t.} & \quad Ax_e = b \\ & \quad T_e x_e + W_e y_e = h_e, \quad e = 1, \dots, |\mathcal{E}| \\ & \quad \sum_{e \in \mathcal{E}} H_e x_e = 0 \\ & \quad x_e, y_e \geq 0 \end{aligned} \quad (4)$$

Donde H_e es una matriz adecuada tal que se cumpla $x_1 = x_2 = \dots = x_{|\mathcal{E}|}$. Esta restricción también podría representarse como $x_e = x_1, \forall e = 2, \dots, |\mathcal{M}|$. Note que si no existiese la restricción de no-anticipabilidad, el problema (4) podría descomponerse en términos de cada escenario e . Los métodos de descomposición dual y el *Progressive Hedging* se basan en este concepto. Los subproblemas resultantes solo dependen de variables locales a la realización de la incertidumbre respectiva y pueden ser resueltos en paralelo. Los métodos de descomposición buscan combinar tales soluciones y resolver los subproblemas iterativamente hasta cumplir el criterio de no-anticipabilidad. En la sección 4 se describirá nuestra propuesta de método de descomposición basada en el índice de similitud descrito en la sección 3.

Cabe resaltar que los problemas de *scheduling* habitualmente tienen una componente de tiempo. Concretamente, este trabajo se centra en formulaciones donde el tiempo aparece discretizado en $|\mathcal{M}|$ periodos, $t = t_1, \dots, t_{|\mathcal{M}|}$. De esta forma, el horizonte de tiempo durante el que no se conoce el verdadero valor de los parámetros inciertos (primera etapa) recibe el nombre de horizonte robusto, $t = t_1, \dots, t_R$.

3. Índice de similitud

El uso de un índice de similitud para problemas de *scheduling* fue propuesto inicialmente por Palacín et al. (2018). Allí, el índice de similitud se usaba para medir la semejanza de las soluciones de segunda etapa. De esta forma, era posible especificar un nivel mínimo de similitud de la solución. Si no se especificaba un mínimo, la solución resultante era igual a la del problema de dos etapas puro. Al contrario, especificando un índice de similitud mínimo de 100%, las soluciones de segunda etapa deberían ser iguales para todos los escenarios. Para implementaciones industriales la aplicación de este tipo de parámetros puede mejorar la robustez de la solución y así no preocupar a los operadores que podrían llegar a sentirse incómodos con soluciones demasiado diferentes (McAllister et al., 2020).

Aunque fue propuesto inicialmente para medir la semejanza entre variables de segunda etapa, no hay nada que impida su uso para variables de primera etapa. Este podría servir como reemplazo de las restricciones de no-anticipabilidad. Es decir, un índice de similitud igual a 100% implica que se satisface el criterio de no-anticipación. Se puede establecer un procedimiento iterativo en el que se eliminen las restricciones de no-anticipabilidad y se calcule el índice de similitud. Los escenarios se podrían resolver como subproblemas independientes en los que se intenta maximizar el índice de similitud. Inicialmente habrá poca semejanza, pero a medida que avanzan las iteraciones se puede actualizar un parámetro para dar más importancia a aumentarla. Eventualmente la semejanza será completa y se llegará a una solución factible del problema original.

Se hará una interpretación gráfica del índice de similitud para luego definir su fórmula. Considere que se quiere calcular el aporte de alguna decisión discreta x al índice de similitud en el instante de tiempo t , teniendo el problema en cuestión tan solo dos escenarios. Además, se considera un horizonte de borrosificación de tres periodos de tiempo. Esto es, se considera que la variable aporta al índice de similitud si es tomada en t , $t+1$ o $t-1$, fuera de estos periodos el aporte es nulo. La imagen superior de la Figura 1 muestra que la decisión x es tomada en $t-2$ en el escenario A y en $t+2$ en el escenario B. Así, no hay ninguna intersección y el aporte al índice de similitud es cero. La siguiente imagen, muestra que la decisión se toma en $t-1$ y $t+1$ para los escenarios A y B respectivamente. Ahora si que se puede apreciar una intersección correspondiente al instante t . El aporte al índice de similitud sería de 0,5, siendo el área de intersección máxima pasible igual a 2. La imagen inferior muestra una semejanza total entre las decisiones tomadas en ambos escenarios, por lo que el aporte al índice de similitud es de 2. Si esto se repite para todas las decisiones y los instantes de tiempo y se divide su suma por el área máxima posible se obtiene el índice de similitud.

Para un horizonte robusto de t_R periodos, un horizonte de borrosificación de tres periodos, un conjunto de escenarios \mathcal{E} y un conjunto de decisiones discretas x_{te} de las cuáles solo una se puede tomar en t , el índice de similitud está definido por la ecuación (5). El numerador es la intersección entre el área generada por cada una de las variables borrosificadas en cada instante de tiempo y el denominador es el máximo área de intersección posible.

$$SI := \sum_{t=1}^{t_R} \frac{\min_{e \in \mathcal{E}} \{x_{te} + 0,5x_{(t-1)e}|_{t>1} + 0,5x_{(t+1)e}|_{t<t_R}\}}{2t_R - 1} \quad (5)$$

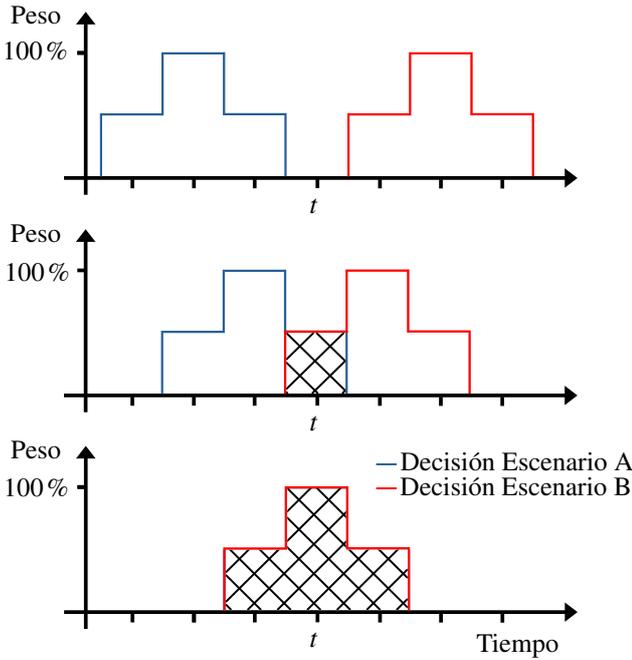


Figura 1: Ejemplo de borrosificación de una decisión discreta a lo largo de tres periodos de tiempo. La malla representa la intersección entre las variables borrosificadas.

Debe tenerse en cuenta que la ecuación (5) es no lineal debido al cálculo del área de intersección. Esta formulación no serviría para los problemas mixto-entero lineales que suelen resultar en el área de *scheduling*. Es posible calcular una cota inferior del índice de similitud usando una serie de variables de holgura como se muestra en la desigualdad (6). Para que esta cota sea estrecha, las variables de holgura deben estar incluidas en la función objetivo del problema de forma tal que sean maximizadas. La cota inferior del índice de similitud estaría dada entonces por la ecuación (7).

$$s_t \leq x_{te} + 0,5x_{(t-1)e}|_{t>1} + 0,5x_{(t+1)e}|_{t<t_R} \quad \forall e \in \mathcal{E}; t: 1, \dots, t_R \quad (6)$$

$$SI \geq \sum_{t=1}^{t_R} \frac{s_t}{2t_R - 1} \quad (7)$$

Esto da origen a dos diferentes tipos de índices de similitud. Uno global que se calcula a partir de las soluciones de los subproblemas, con la ecuación (5), y sirve para saber la semejanza real de las soluciones de primera etapa. Y otro local para cada subproblema (escenario) que depende únicamente de las variables del subproblema en cuestión y de la solución del subproblema que tuvo el peor índice de similitud local en la iteración anterior. Aquí hay dos aspectos a resaltar. Por una parte, la necesidad de usar una solución anterior pues de lo contrario el problema no se podría descomponer por cada escenario. Esto es habitual en otros métodos de descomposición como el *Progressive Hedging* y la descomposición dual. Por otra parte, se usa la solución del subproblema que tuvo el peor índice de similitud local en la iteración previa debido a que usar todas las soluciones podría dar lugar a oscilaciones y, además, la solución del problema global seguramente está limitada por algún valor extremo de los parámetros inciertos.

Nota: El horizonte de borrosificación puede ser mayor a tres días. La fórmula para calcular el SI sería ligeramente diferente pero la idea es la misma. El peso que se asigna en el periodo

$t \pm k$ a una decisión tomada en t disminuye proporcionalmente a la distancia k .

4. Método de descomposición

En esta sección se describirá el algoritmo necesario para descomponer problemas estocásticos de *scheduling* de dos etapas usando el índice de similitud. *SI* se referirá al índice de similitud global y *SI_e* al índice de similitud local. Tras eliminar las restricciones de no-anticipabilidad los subproblemas quedarían como se muestra en (8).

$$\begin{aligned} \min_{y_{te}, s_t} \quad & J_e - \lambda \sum_{t=1}^{t_R} \frac{s_t}{2t_R - 1} \\ \text{s.t.} \quad & \text{Ecuaciones del modelo} \\ & s_t \leq \bar{x}_t + 0,5\bar{x}_{t-1}|_{t>1} + 0,5\bar{x}_{t+1}|_{t<t_R}, \quad t: 1, \dots, t_R \\ & s_t \leq x_{te} + 0,5x_{(t-1)e}|_{t>1} + 0,5x_{(t+1)e}|_{t<t_R}, \quad t: 1, \dots, t_R \end{aligned} \quad (8)$$

Note que a la función objetivo se le resta un término, este es el producto entre el índice de similitud local y su parámetro de importancia λ . Entre mayor sea λ mayor prioridad se dará en la optimización a maximizar el índice de similitud local. Este parámetro puede actualizarse usando el método del subgradiente (Shor, 1985) como aparece en (9). Las variables \bar{x} representan la solución en la iteración anterior del subproblema que obtuvo el peor (menor) índice de similitud local.

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k - \alpha_{k+1} (SI - 1) \quad (9)$$

El algoritmo empieza definiendo un valor inicial para el parámetro α_0 y el número máximo de iteraciones. Luego, se solucionan cada uno de los subproblemas para calcular un valor inicial para el SI a partir de sus soluciones. Luego de la iteración inicial, los subproblemas incorporan el SI local en su función de costo y lo calculan respecto a la solución que obtuvo el peor SI en la iteración anterior. Tras esto, se calcula el SI global para actualizar el multiplicador λ y se determina el subproblema que tuvo el peor SI local. Se verifica si el número de iteraciones ya ha alcanzado el máximo o si el SI global ya llegó al 100%. Si ninguna de estas dos condiciones se cumple, se vuelven a solucionar los subproblemas con el nuevo valor de λ y la nueva peor solución. En el Algoritmo 1 se muestra una explicación más explícita del procedimiento.

Algoritmo 1 Descomposición por Índice de Similitud

Requerir: $\alpha_0, k_{\text{máx}}$

- 1: $k \leftarrow 0, \lambda_0 \leftarrow 0, \bar{x}_t \leftarrow 0$ ▷ Inicializar
- 2: **repetir**
- 3: **para** e in \mathcal{E} **realice**
- 4: $x_{te}^*, s_t^* \leftarrow \arg \min_{x_{te}, s_t} J_e - \lambda_k SI_e$ ▷ Resolver (8)
- 5: $SI_e^* \leftarrow SI_e(s_t^*)$
- 6: **fin para**
- 7: $SI \leftarrow \text{Eq. (5) con } x_{te}^*$ ▷ Calcular SI global
- 8: $\bar{x}_t \leftarrow \arg \min_{x_{te}^*} \{SI_e^*\}$ ▷ Solución con peor SI_e
- 9: $\alpha_{k+1} \leftarrow 0,9\alpha_k$ ▷ Actualizar el multiplicador
- 10: $\lambda_{k+1} \leftarrow \lambda_k - \alpha_{k+1} (SI - 1)$
- 11: $k \leftarrow k + 1$
- 12: **hasta** $SI = 1 \vee k = k_{\text{máx}}$ ▷ Verificar convergencia
- 13: **devuelva** x_{te}^*

5. Caso de estudio

En esta sección se explica el caso de estudio de la planificación de una red de evaporación sobre el que se va a probar la propuesta de descomposición. La red de evaporación consiste en un conjunto de evaporadores que deben concentrar algunas corrientes de diferentes solventes químicos para su reutilización en el proceso principal. Los evaporadores se ensucian progresivamente por lo que pasado cierto tiempo se deben detener para limpiarlos. Estos a su vez solo pueden procesar un tipo de corriente y para cambiarla deben ser limpiados en primer lugar.

Existen dos tipos de limpieza: una ligera que cuesta poco pero no logra recuperar completamente la eficiencia y una profunda que es costosa pero que logra que el evaporador vuelva a la eficiencia nominal. Así, cada evaporador puede estar en las siguientes etapas: operando, en espera antes de ser limpiado y en espera tras ser limpiado. La transición en cada una de estas etapas está determinada de antemano. Un evaporador que esté procesando cierto producto solo puede seguir procesando ese producto o parar para ser limpiado o ser puesto en espera. Un evaporador que está en espera y está sucio solo puede volver a operación tras una etapa de limpieza. Un evaporador que está en limpieza puede empezar a operar o puede ser puesto en espera. Por último, un evaporador que está en espera y limpio, puede seguir en tal estado o empezar a operar.

De esta forma, el problema de optimización consiste en determinar la asignación y carga de solventes a los evaporadores y la transición entre etapas, incluyendo cuándo pararlos para su limpieza. Palacín et al. (2018) propusieron un modelo que tiene todo esto en cuenta y que, además, considera incertidumbre en dos parámetros: la demanda de cada una de las corrientes de solvente y temperatura exterior (la cual afecta la carga máxima de los evaporadores). El horizonte de predicción es de un mes y es discretizado en periodos de un día de duración. El horizonte robusto tiene una duración de siete días.

Para conocer los detalles del modelo se refiere al lector a Palacín et al. (2018). La ecuación (10) muestra la función objetivo del problema de optimización. La ecuación (11) muestra la fórmula, adaptada a la nomenclatura del caso de estudio, para calcular el SI global. Las ecuaciones (12) y (13) muestran la fórmula y las desigualdades para calcular el SI local.

- Problema de optimización:

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2^{p+1}|\mathcal{M}|} \sum_{e \in \mathcal{E}} \sum_{t \in \mathcal{M}} \sum_{v \in \mathcal{V}} [K_F(v)D_{vte} + K_L E_{vtsL} \\ & + \sum_{p \in \mathcal{P}} (K_T(v)T_{out}(t) + K_E(v))F_{vtp}] + T_C \\ \text{s.t.} \quad & \text{Ecuaciones del modelo} \\ & \{E_{v1se}, P_{v1se}, D_{v1e}, F_{v1pe}\} \in \mathcal{S} \\ & P_{vtp} \in \mathcal{A}, \quad F_{vtp} \in \mathbb{R}_{\geq 0}, \quad D_{vte} \in \mathbb{N} \\ & \{E_{vise}, P_{vipe}\} \in \{0, 1\} \end{aligned} \quad (10)$$

- SI global:

$$SI = \sum_{v \in \mathcal{V}} \sum_{s \in \mathcal{S}} \sum_{t \in \mathcal{M}_R} \min_{e \in \mathcal{E}} \left\{ E_{vise} + \frac{1}{2} (E_{v(t-1)se}|_{t>1} + E_{v(t+1)se}|_{t+1 \leq t_R}) \right\} / (n_v(2t_R - 1)) \quad (11)$$

- SI local:

$$SI_e = \sum_{v \in \mathcal{V}} \sum_{s \in \mathcal{S}} \sum_{t \in \mathcal{M}_R} \frac{s_{vts}}{n_v(2t_R - 1)} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} s_{vts} &\leq \bar{E}_{vts} + \frac{1}{2} (\bar{E}_{v(t-1)s}|_{t>1} + \bar{E}_{v(t+1)s}|_{t+1 \leq t_R}) \\ s_{vts} &\leq E_{vise} + \frac{1}{2} (E_{v(t-1)se}|_{t>1} + E_{v(t+1)se}|_{t+1 \leq t_R}) \\ &\quad \forall v \in \mathcal{V}, s \in \mathcal{S}, t \in \mathcal{M}_R \end{aligned} \quad (13)$$

6. Resultados

Se consideró una única instancia del caso de estudio con nueve evaporadores y cinco productos. Se generaron 16 escenarios para los parámetros inciertos. El problema original tiene en total 618242 variables, de las cuales 563040 son binarias. El número de variables de cada subproblema es 16 veces menor. Se usó el solucionador Gurobi con los valores de los parámetros por defecto para ambos casos (monolítico y descompuesto). Los únicos parámetros que se modificaron fueron la brecha de optimalidad (*optimality gap*) que se fijó en 0,01 % y el número de hilos del procesador asignados. Para el problema monolítico se usaron en total 32 hilos, mientras que para el problema descompuesto se usaron dos hilos por cada subproblema. Además, se fijó un límite de tiempo de cómputo de 10 días. Para el enfoque de descomposición, se permitió que el solucionador usará las soluciones previas de los subproblemas como punto de partida. La Tabla 1 muestra los resultados en términos de tiempo de cómputo y función objetivo.

Tabla 1: Resultados.

Problema	Objetivo	Tiempo (s)	Iteraciones
Original	527617	864000	-
Descompuesto	527612	12648	3

El tiempo de cómputo del enfoque descompuesto es mucho menor y el valor objetivo es ligeramente mejor (minimización). La mejora en el tiempo de cómputo es dramática, en tan solo tres horas se logró obtener una solución comparable que la que obtuve el enfoque monolítico en diez días. La convergencia se logró en tan solo 3 iteraciones, lo que significa que cada subproblema debió resolver 3 veces. Sin embargo, el solucionador empieza desde una solución previa lo cual disminuye considerablemente el tiempo requerido para llegar a una nueva solución. Teniendo en cuenta el horizonte de predicción de 1 mes del caso de estudio, nuestra propuesta de descomposición haría factible la implementación del problema estocástico de *scheduling* en tiempo real en la fábrica. Aunque solo se usaron 16 escenarios en el caso de estudio, la ventaja del método de descomposición previsiblemente aumentaría proporcionalmente al número de escenarios.

7. Conclusiones

Se propuso un método de descomposición para problemas de *scheduling* estocásticos de dos etapas basado en un índice de similitud. Al eliminar las restricciones de no-anticipabilidad, el problema puede descomponerse por escenarios. Es decir, cada

escenario de realización de la incertidumbre se puede escribir como un problema de optimización. Estos se resuelven independientemente y en paralelo y luego la semejanza entre las soluciones es medida usando el índice de similitud. Además, un cálculo local para los índices de similitud es introducido en los subproblemas de forma tal que progresivamente se va exigiendo que este mejore. Eventualmente, el índice de similitud debe alcanzar un valor del 100% lo que implica la satisfacción de las restricciones de no-anticipabilidad.

La principal ventaja del método descomposición propuesto es la reducción de dimensión de los subproblemas lo que repercute en un menor tiempo necesario para llegar a una solución óptima. Esto se evidenció en un caso de estudio de escala industrial. Nuestro método de descomposición logro llegar a una mejor solución en tan solo tres horas que la que obtenía el enfoque tradicional tras 10 días de cálculo.

Es interesante discutir sobre el efecto de los parámetros del algoritmo. En este trabajo, se consideró un horizonte de borrosificación de tan solo tres periodos de tiempo. Esto resulta adecuado para problema en los que el horizonte robusto no es muy largo. Para problemas con horizontes más largos podría ser necesario aumentar el número de periodos de tiempo considerados para el cálculo del índice de similitud para evitar oscilaciones. Por otra parte, el parámetro α_0 que define la agresividad del aumento de la importancia de maximizar el SI local tiene un efecto importante en el comportamiento del algoritmo. Si se especifica un valor muy alto, el algoritmo tenderá a alcanzar rápidamente un SI del 100% a costa de la optimalidad de la solución. Valores pequeños facilitan la obtención de una mejor solución en términos de optimalidad, pero requiriendo un mayor número de iteraciones para alcanzar la convergencia. Su valor entonces deberá fijarse dependiendo de cada problema. Se recomienda empezar por valores altos y luego reducirlo hasta encontrar un valor adecuado.

Aunque los resultados fueron satisfactorios, aún hay cuestiones abiertas que requieren atención. La convergencia del algoritmo es muy importante de cara a implementaciones industriales y aún no se ha estudiado. El trabajo futuro se concentrará en ello y en ampliar la formulación a problemas estocásticos de

múltiple etapas y de tiempo continuo.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación, la Agencia Estatal de Investigación y la Unión Europea (fondos FEDER) bajo los proyectos InCO4In (PGC2018-099312-B-C31) y LOCPU (PID2020-116585GB-I00). Daniel Montes agradece al Banco Santander y la Universidad de Valladolid por la financiación recibida a través de la convocatoria 2020 de contratos predoctorales.

Referencias

- Benders, J.F., 1962. Partitioning procedures for solving mixed-variables programming problems. *Numer. Math.* 4, 238–252.
- Carøe, C.C., Schultz, R., 1999. Dual decomposition in stochastic integer programming. *Oper. Res. Lett.* 24, 37–45.
- Grossmann, I.E., 2021. *Advanced Optimization for Process Systems Engineering*. Cambridge University Press, Pennsylvania.
- Li, C., Grossmann, I.E., 2021. A Review of Stochastic Programming Methods for Optimization of Process Systems Under Uncertainty. *Front. Chem. Eng.* 0, 34.
- McAllister, R.D., Rawlings, J.B., Maravelias, C.T., 2020. Rescheduling Penalties for Economic Model Predictive Control and Closed-Loop Scheduling. *Ind. Eng. Chem. Res.* 59, 2214–2228.
- Palacín, C.G., Pitarch, J.L., Jasch, C., Méndez, C.A., de Prada, C., 2018. Robust integrated production-maintenance scheduling for an evaporation network. *Comput. Chem. Eng.* 110, 140–151.
- Rahmaniani, R., Crainic, T.G., Gendreau, M., Rei, W., 2017. The Benders decomposition algorithm: A literature review. *Eur. J. Oper. Res.* 259, 801–817.
- Rockafellar, R., Wets, R., 1991. Scenarios and policy aggregation in optimization under uncertainty. *Math. Oper. Res.* 16, 119–147.
- Shor, N.Z., 1985. *Minimization Methods for Non-Differentiable Functions*. volume 3. 1 ed., Springer.

Erika Oliveira-Silva^{*a}, Cesar de Prada^a, Daniel Navia^b

^a Departamento de Ingeniería de Sistemas y Automática, Universidad de Valladolid. C/ Real de Burgos s/n, 47011, Valladolid, España

^b Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Avd. Vicuña Mackenna, Campus San Joaquín, Santiago, Chile

Resumen

El presente trabajo propone una arquitectura de un control predictivo económico (eMPC) integrado con la metodología de adaptación de modificadores (Modifier Adaptation, MA) (Marchetti et al., 2009) de forma que permita a llevar un proceso a su punto de operación óptimo real. Con el objetivo de acelerar el tiempo al óptimo, se propone que los modificadores del MA se actualicen a la misma frecuencia del controlador. Para ello, los gradientes de proceso o directamente los modificadores del MA deberán ser estimados usando datos del transitorio del proceso. Consecuentemente, estos valores no serán los valores de los gradientes/modificadores requeridos para el MA, pero, cuando el proceso alcance el estado estacionario los gradientes/modificadores convergerán a este valor.

Este trabajo presenta los algoritmos para la estimación directa de los modificadores (Dynamic Modifier Estimator, DME) (Oliveira-Silva et al., 2021a) y para la estimación de gradientes de proceso (Transient Modifier Adaptation, TMA) (Oliveira-Silva et al., 2021b). Ambos métodos no necesitan de un modelo de proceso intermedio de entrada-salida, además, utilizan medidas transitorias y pueden ser ejecutados en el mismo tiempo de muestreo del eMPC, pretendiendo reducir el tiempo de convergencia del método en procesos con dinámica lenta.

Las imágenes 1 y 2 presentan la arquitectura RTO+MA+MPC propuesta. Las dos arquitecturas son muy similares y están compuestas por un módulo para estimación de los estados (Moving Horizon Estimator, MHE), el controlador con objetivo económico integrado con MA (eMPC+MA) y por último, el módulo de estimación directa de modificadores (DME), Imagen 1, o de estimación de gradientes del proceso (TMA), Imagen 2. Donde \mathbf{u}_{k-1} son las entradas anteriores, \mathbf{y}_k son las salidas medidas, $\hat{\mathbf{x}}_k$ son los estados y \mathbf{v}_k son las perturbaciones estimadas por el MHE. La función de costo económica es $\phi_{p,k}$ y sus restricciones $\mathbf{g}_{p,k}$ estimadas en línea. Finalmente λ_k , γ_k y ϵ_k son los modificadores de primer orden para la función de costo, restricciones y los modificadores de orden cero para las restricciones, respectivamente.

El módulo DME tiene como objetivo estimar directamente los modificadores de MA, sin necesidad de calcular explícitamente los gradientes del proceso y del modelo. El DME utiliza un problema de optimización que trata de minimizar la diferencia entre la función costo o restricciones modificadas con las medidas del proceso en transitorio usando un horizonte móvil. Las variables de decisión del problema de optimización son los modificadores dinámicos que coincidirán con los modificadores estáticos requeridos por MA cuando el proceso alcance el estado estacionario.

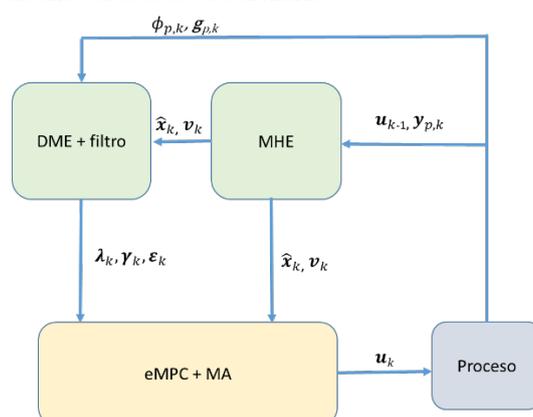


Imagen 1. Arquitectura del eMPC+MA+DME.

Por otro lado, el TMA está basado en su antecedente que aparece en Navia et al. (2017) y Rodríguez-Blanco et al. (2017) donde se utiliza una expansión en serie de Taylor que relaciona las salidas, entradas y gradientes del proceso que se desea estimar. En Navia et al. (2017) y Rodríguez-Blanco et al. (2017), el método fue formulado para un contexto RTO (Real Time Optimization) y no tenía en cuenta los efectos dinámicos, por lo que sólo se consideró la dependencia de las variables de decisión pasadas. Debido a ello, la optimización y el control se aplicaron a diferentes escalas de tiempo. En este trabajo, la serie de Taylor fue expandida de forma que considera el efecto del tiempo (la derivada en el tiempo). Esta derivada se puede estimar mediante una aproximación polinómica que requiere datos pasados utilizando el vector de Nordsieck (Bank et al., 1993). Una vez calculada la dependencia temporal, se pueden implementar algoritmos de identificación recursiva para estimar una aproximación de las derivadas del proceso con respecto a las variables de decisión.

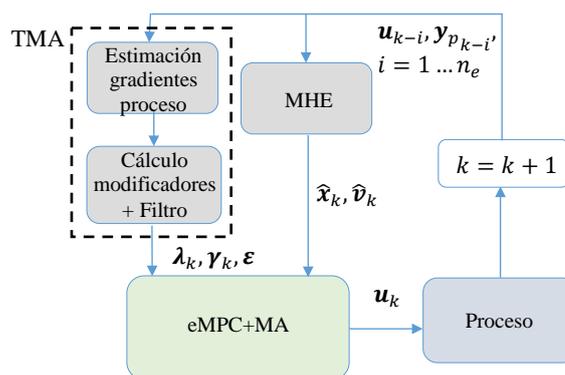


Imagen 2. Arquitectura del eMPC+TMA.

Durante el transitorio, para ambos algoritmos (DME o TMA), los modificadores o gradientes estimados no son los requeridos para el MA, por lo que, durante este tiempo, el controlador sólo implementará correcciones parciales. Aun así, cuando el proceso converja al estado estacionario proporcionará una estimación del comportamiento de los modificadores/gradientes del proceso que coincidirá con los valores estáticos requeridos por el MA, y entonces, el proceso podrá evolucionar hacia el óptimo real del proceso.

Los enfoques anteriormente presentados (imagen 1 e imagen 2) se aplicaron en un ejemplo de referencia muy conocido: el reactor Williams-Otto, en el que el modelo y el proceso tienen un desajuste paramétrico y estructural significativo.

Los resultados de la arquitectura con el algoritmo de DME, demostraron que este nuevo enfoque puede alcanzar valores bastante cercanos al punto óptimo de funcionamiento económico real a pesar del desajuste paramétrico y estructural entre el modelo y el proceso.

El algoritmo TMA también ha sido capaz de alcanzar al óptimo de proceso en el ejemplo de Williams-Otto con o sin restricciones activas. La inclusión la dependencia del tiempo ha sido muy importante y la falta de este término hace que el algoritmo falle en la detección del óptimo del proceso, debido al mal cálculo de los modificadores de primer orden.

Como trabajo futuro, para el caso de DME, se necesita estudiar una metodología para seleccionar los valores de ajuste. Para el TMA, puede ser interesante estudiar el uso de otras aproximaciones para describir la dependencia temporal de una manera más robusta. Además, es importante garantizar que el proceso tenga la excitación necesaria para que el método de identificación pueda estimar adecuadamente los gradientes y que el método de identificación elegido sea capaz de acompañar los cambios de los parámetros (gradientes) en transitorio. Finalmente, se pretende aplicar estas dos metodologías para optimización en tiempo real de una fraccionadora de propano-propileno de una refinería real.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido realizado parcialmente gracias al apoyo de la JCYL bajo los programas CLU 2017-09 y UIC 233, así como por el proyecto InCO4In, de la AEI española bajo el proyecto PGC2018-099312-B-C31, ambos con fondos FEDER. Los autores agradecen al Fondo Social Europeo y a la Consejería de Educación de la Junta de Castilla y León.

Referencias

- Bank, R., Graham, R.L., Stoer, J., Varga, R., Yserentant, H., 1993. Solving Ordinary Differential Equations I, Math2, Springer Series in Computational Mathematics. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-78862-1>
- Marchetti, A., Chachuat, B., Bonvin, D., 2009. Modifier-Adaptation Methodology for Real-Time Optimization. Ind. Eng. Chem. Res. 48, 6022–6033. <https://doi.org/10.1021/ie801352x>
- Navia, D., Puen, A., Bergh, L., Rodríguez-Blanco, T., Sarabia, D., de Prada, C., 2017. Modifier-Adaptation Based on Transient Measurements Applied to a Laboratory-Scale Flotation Column. Comput. Aided Chem. Eng. 40, 1729–1734. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63965-3.50290-7>
- Oliveira-Silva, E., de Prada, C., Navia, D., 2021a. Dynamic optimization integrating modifier adaptation using transient measurements. Comput. Chem. Eng. 149, 107282. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2021.107282>
- Oliveira-Silva, E., de Prada, C., Navia, D., 2021b. Economic MPC with Modifier Adaptation using Transient Measurements, in: Computer Aided Chemical Engineering. Elsevier Masson SAS, pp. 1253–1258. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-88506-5.50193-5>
- Rodríguez-Blanco, T., Sarabia, D., Pitarch, J.L., de Prada, C., 2017. Modifier Adaptation methodology based on transient and static measurements for RTO to cope with structural uncertainty. Comput. Chem. Eng. 106, 480–500. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2017.07.001>

Fernando Gutiérrez^{*a}, Rogelio Mazaeda^{a,b}, Jesús M. Zamarreño^{a,b}

^a Grupo de Control y Supervisión de Procesos. Universidad de Valladolid (UVa). C/Dr. Mergelina s/n, 47011 Valladolid, España

^b Institute of Sustainable Processes, Dr. Mergelina s/n, 47011 Valladolid, Spain

Resumen

Este artículo describe un administrador de simulación dinámica distribuida, escrito en PYTHON, que utiliza el estándar de interoperabilidad OPC UA para comunicarse con los diferentes servidores que constituyen una simulación distribuida. Estos últimos se implementan utilizando la herramienta de modelado de procesos y simulación ECOSIMPRO y están disponibles como servidores OPC. Dicha herramienta actúa como un cliente configurable OPC UA con la misión de controlar el ritmo de los módulos de simulación subyacentes que intercambian datos con la frecuencia adecuada. La novedad del enfoque descrito reside en adaptar dinámicamente esta cadencia de intercambio de datos a medida que avanza la simulación, con el fin de obtener la máxima velocidad media de simulación cumpliendo con el grado de precisión preconfigurado. Esta estrategia es análoga a los algoritmos de control de paso utilizados en el software de integración dinámica desarrollados con anterioridad.

1. Introducción

La simulación numérica dinámica de sistemas es una actividad clave de cualquier proyecto científico. El modelado y simulación está presente en cada una de las fases del desarrollo de cualquier solución técnica. Con el auge de la digitalización en la industria y de paradigmas como el de la Industria 4.0, la relevancia de la simulación ha crecido rápidamente. El concepto de “gemelo digital” (“twin model”) se concibe como un modelo de simulación representativo de un proceso real, fundamental en el proceso de toma de decisiones.

Un modelo de simulación será útil en la medida que refleje con el nivel de detalle adecuado al referente real. Pero un nivel de detalle alto puede resultar en una carga computacional muy grande, tal vez excesiva para la aplicación concreta de que se trate. Una forma de lidiar con este problema puede ser el uso de modelos jerárquicos de diferentes niveles de complejidad, y por otro lado disponer de una simulación distribuida que divida la carga computacional en varios ordenadores. La simulación distribuida exigirá el intercambio de los datos necesarios entre todos los agentes desplegados. Se deberá elegir el ritmo al que se realizan estos intercambios, para minimizar el error en que inevitablemente se incurre, con respecto a una hipotética simulación monolítica. Habrá entonces un compromiso entre la velocidad global de la simulación distribuida y el error cometido.

Existen varias aportaciones previas en este campo [1]. La que describiremos en esta contribución hereda directamente de las soluciones ya aplicadas con éxito y referenciadas en [2],[3] y [4]. Estos trabajos previos utilizaron como protocolo de intercambio de datos el brindado por el estándar de interoperabilidad industrial OPC DA. En los últimos años ha ganado fuerza la nueva versión del protocolo, OPC UA, con una arquitectura más general y con características multiplataforma.

Este artículo describe las características generales de un administrador de simulación distribuida utilizando OPC-UA programado en el lenguaje de programación PYTHON.

2. Materiales y Métodos

2.1 Herramientas de software empleadas

La herramienta para la gestión distribuida que se desarrolla se denomina DSM-UA, Distributed Simulation Manager, para OPC UA. Esta herramienta realiza la coordinación de varias simulaciones dinámicas, intercambiando datos entre ellas. Es una herramienta desarrollada en Python, que utiliza el estándar OPC UA para la comunicación con los diferentes submodelos. En el ejemplo que aquí se discute, los modelos han sido creados en ECOSIMPRO, aprovechando las capacidades que esta herramienta tiene de encapsular los modelos de simulación y los algoritmos de integración numérica necesarios, como servidores OPC UA.

2.1.1. Lenguaje de simulación ECOSIMPRO

ECOSIMPRO es un entorno de modelado y simulación dinámica orientada a objetos. Los modelos dinámicos desarrollados resultan, de forma general, en sistemas de ecuaciones diferenciales y algebraicas (DAEs) que pueden ser simulados utilizando diferentes algoritmos de integración numérica. La herramienta permite simular con éxito sistema híbridos que combinen las DAE continuas con la atención a eventos discretos.

2.1.2. Estándar OPC UA

OPC UA es la combinación de las siglas de Open Platform Communication y Unified Architecture. Es un estándar de interoperabilidad muy utilizado en la industria de procesos. OPC UA tiene una serie de ventajas sobre su antecesor directo, el OPC DA (acceso a datos) u OPC clásico. Es un estándar que ahora no está limitado, como antes, a las plataformas de tipo Windows. Puede ofrecer, además, mejora en cuanto a la seguridad de las comunicaciones.

2.1.3. Lenguaje PYTHON

Python es un lenguaje interpretado de alto nivel, con estructuras de datos muy flexibles. Brinda soporte para diferentes paradigmas, desde la programación estructurada, al de la programación orientada a objetos o, incluso, la programación funcional. La adopción de Python implica que además se tiene acceso a todo el ecosistema asociado de paquetes y librerías, que son actualizadas por una amplia comunidad de desarrolladores. Se emplea en concreto el módulo OPC-UA y la librería Openpyxl, apoyada en los módulos habituales SciPy e IPython.

2.2 Modelo empleado

Para llevar a cabo la prueba del software DSM-UA y las librerías programadas, se ha tomado como referencia un modelo de funcionamiento sencillo a modo de test. El proceso de generación de un modelo queda fuera del objeto del presente artículo. El modelo consiste en la unión de un número predeterminado de depósitos que intercambian un flujo másico. Se dispone de una simulación monolítica cuyo objetivo es servir de referencia para la simulación distribuida que se realiza y verificar su funcionamiento. Para este ejemplo concreto, se ha dividido el modelo completo en dos submodelos que se simulan de forma distribuida.

Para ambas simulaciones, ya sea la simulación monolítica o la distribuida, se dispone de servidores OPC UA, obtenidos mediante ECOSIMPRO. Estos servidores tienen definidas como variables de salida los niveles que alcanza el agua en cada uno de los depósitos y como entradas la altura de entrada al primer depósito, a modo de fuente de flujo. Para la simulación distribuida, además del nivel del primer depósito de cada uno de los servidores, se configuran como variables de salida las que conectan ambas partes de la simulación que constituyen las variables de intercambio entre ambos.

La complejidad del sistema y por tanto el esfuerzo computacional que requiere se puede cambiar con facilidad mediante un parámetro de construcción del modelo. En el ejemplo que utilizaremos consta de 50 tanques, distribuidos según se muestra en la figura 1.

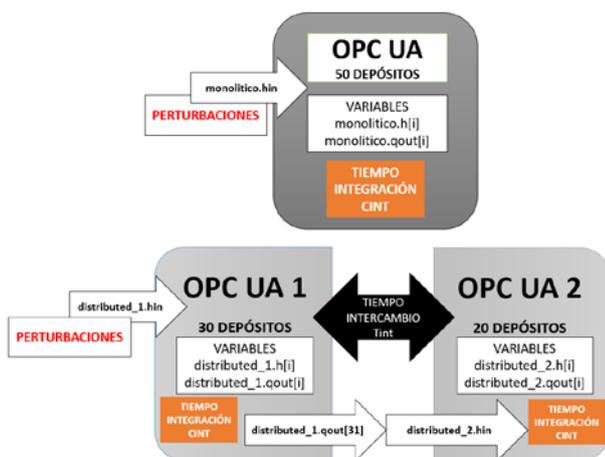


Figura 1: Modelo empleado para prueba de concepto de DSM-UA

Una vez que se dispone de la partición generada, se diseña un experimento en el cual se asignan valores a los parámetros

de entrada de cada simulación. Para el correcto funcionamiento de la simulación ambas simulaciones deben de partir del mismo estado, con el fin de evitar desfases en el funcionamiento. En cuanto a la simulación distribuida, las variables intercambiadas deben también partir del mismo valor inicial.

Mediante el empleo de este modelo, se tiene la capacidad de introducir perturbaciones para evaluar su impacto sobre la simulación distribuida.

2.3 Descripción del administrador DSM-UA

2.3.1. Objetivos

El principal objetivo es la creación de una herramienta fácil de configurar y que permita el intercambio de variables entre las diferentes simulaciones.

El error en el que se incurre debido a la división de la simulación de referencia, en varias simulaciones distribuidas, será mayor cuanto menor sea la frecuencia a la que se intercambian los valores de las variables compartidas en la frontera entre dichas simulaciones. Por otra parte, a mayor frecuencia de intercambio, menor será la velocidad ejecución de la simulación completa.

Por otra parte, para un error asumible prefijado, la frecuencia requerida será mayor, en aquellos regímenes en que la simulación está sometida a cambios dinámicos debido a la presencia de perturbaciones. Es fácil de entender, por otra parte, que, en una situación aproximadamente estacionaria, la frecuencia de intercambio puede disminuir notablemente, permitiendo una ejecución más rápida.

La principal idea es la de variar el tiempo de intercambio a lo largo de la simulación, de una manera análoga a como lo hacen los algoritmos de control del paso utilizados en la simulación numérica de DAE (ecuaciones diferenciales algebraicas). De manera que, en aquellos momentos, a lo largo de la simulación, en los que el error es pequeño, se pueda disminuir la frecuencia de intercambio y a la inversa.

El error de simulación que se utiliza en los algoritmos numéricos con control del paso de integración, como, por ejemplo, el algoritmo RK45, se obtiene al integrar el modelo dinámico utilizando métodos de diferente orden y por tanto de diferente grado de exactitud. En el caso que nos ocupa, no se tiene esa posibilidad. En este estudio, y para ilustrar el concepto, se utiliza una simulación monolítica del modelo completo, y el error se evalúa con respecto a la misma. Claramente, en una aplicación real, este error deberá ser estimado de una manera diferente y eso será motivo de trabajo futuro.

2.3.2. Estructura

La herramienta de gestión dispone de cuatro partes, la función principal, denominada Distribution Simulation Manager (DSM-UA), la librería OPCUA_FUNCTIONS, la librería FILES_FUNCTIONS y la librería CONTROL_LIBRARY.

La función DSM-UA actúa a modo de cliente e interactúa con el resto de las librerías. Sus principales funciones se muestran en la figura 2, y el algoritmo inicial en la figura 3.



Figura 2: Esquema de Distribution Simulation Manager, DSM-UA

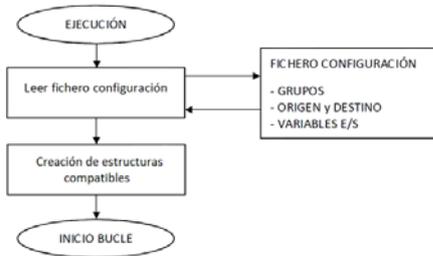


Figura 3: Primeros pasos ejecución.

Una vez se han configurado las variables necesarias, comienza el bucle de simulación realizado por DSM-UA, siguiendo los pasos mostrados en la figura 4.

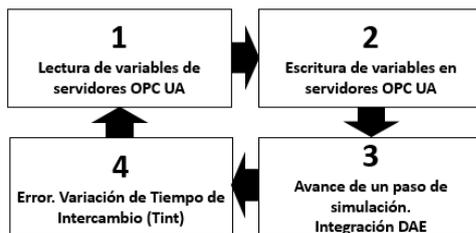


Figura 4: Simulación y control de tiempo de intercambio.

La librería OPCUA_FUNCTIONS contiene las funciones necesarias para la configuración y gestión de los servidores OPC-UA empleados. El esquema se muestra en la figura 5.

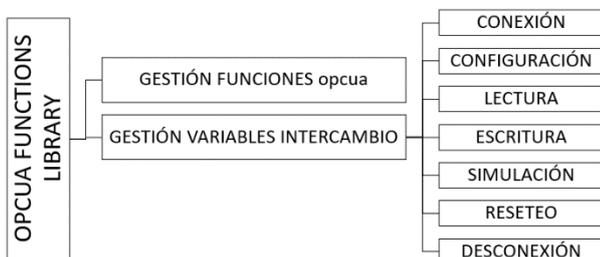


Figura 5: Esquema librería OPCUA_FUNCTIONS.

La librería FILES_FUNCTIONS contiene las funciones necesarias para la lectura de ficheros de configuración y salida de resultados. Sus funciones se muestran en la figura 6.

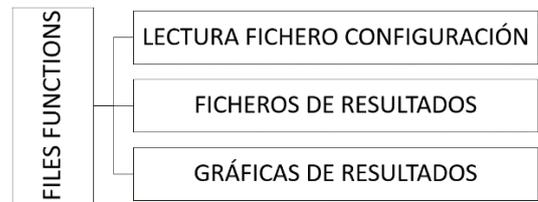


Figura 6: Atribuciones librería FILES_FUNCTIONS

La librería CONTROL_LIBRARY gestiona la variación del tiempo de intercambio (Tint) entre los servidores de la simulación distribuida, mediante la medición del error en base a unas tolerancias predefinidas. Sus atribuciones se muestran en la figura 7.

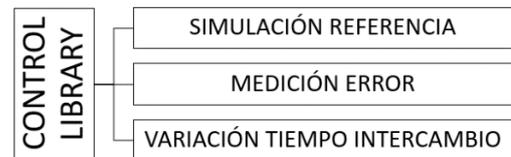


Figura 7: Atribuciones de CONTROL_LIBRARY.

3. Resultados

Mediante el empleo de la herramienta diseñada DSM-UA se realizaron diversas simulaciones de un proceso físico a modo de test para la posterior evaluación de su funcionamiento. Así, para proceder a la experimentación se estableció una configuración previa de las variables de las simulaciones monolítica y distribuida mediante ficheros de texto.

Para la verificación de la influencia del tiempo de intercambio en el error cometido, se diferenció entre una variable del primer servidor y una variable del segundo servidor, que podía presentar un desfase si el tiempo de intercambio era demasiado elevado. Se llevó a cabo primero una simulación de verificación del funcionamiento del modelo. Una vez comprobado que el comportamiento del modelo era adecuado, se obtuvieron representaciones gráficas del comportamiento dinámico de una variable determinada, para una serie de perturbaciones introducidas, así como los intervalos temporales de simulación en los que el error normalizado supera una tolerancia preestablecida del 10%.

Se compararon simulaciones para diferentes tiempos de intercambio fijos y posteriormente se llevaron a cabo una simulación comparativa con un tiempo de intercambio fijo y uno variable en función del error.

3.1 Comparación simulación ECOSIMPRO y DSM-UA

Para la obtención de los resultados, primero se comprobó que la simulación llevada a cabo mediante DSM-UA era equivalente a la simulación obtenida con ECOSIMPRO para, posteriormente, evaluar el comportamiento de la simulación en lo que al error normalizado se refiere. El Tint que fue utilizado es de 1s, siendo fijo. El comportamiento para una variable determinada se muestra en la figura 8, coincidiendo las gráficas para monolítica y distribuida obtenidas mediante el uso de DSM-UA.

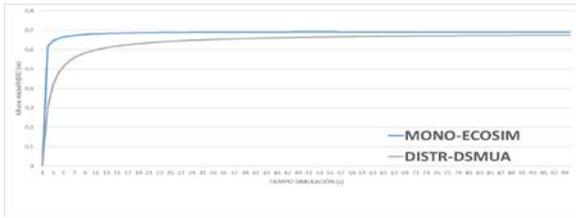


Figura 8: Ejemplo resultado con ECOSIMPRO y DSM-UA

3.2 Comparación de variables de simulación y error

Una vez se llevó a cabo una simulación de referencia para evaluar el comportamiento del modelo, se procedió al estudio del error producido en función de diferentes tiempos de intercambio y mediante variación de los parámetros de entrada de los servidores de la simulación. El error entre ambas simulaciones se calcula en forma de error relativo, según (1).

$$ERROR = \frac{|Y_{MONOLITICO} - Y_{DISTRIBUIDO}|}{Y_{MONOLITICO}} \quad (1)$$

3.2.1. Simulación con tiempo de intercambio fijo

En las siguientes experiencias primero se llevó a cabo la simulación de un proceso durante 3600 segundos, en el cual se introdujeron una serie de perturbaciones, las cuales se introducen para sacar a la simulación del estado estacionario. De esta forma, los errores se evidencian, provocado por el hecho de que es una simulación distribuida y que se intercambian variables cada cierto tiempo.

El tiempo se eligió para poder evaluar diferentes dinámicas de planta, de tal forma que fuese visible una dinámica de rápida variación al inicio de la simulación y luego una variación más lenta, a medida que se alcanza un estado cuasi-estacionario de la simulación. Las perturbaciones se introducen en la variable de entrada, denominada monolitico.hin o distributed_1.hin según sea la entrada para el servidor monolítico o la simulación distribuida. La configuración de esta perturbación se realizó de forma que tanto el valor inicial como el valor de la perturbación sea el mismo para cada uno de los servidores. Esta variable representa la altura de la entrada de fluido del primer depósito, que inicialmente por defecto toma un valor de 0.7 m. En la figura 9 se muestra el diagrama de bloques de la simulación que se utilizó.

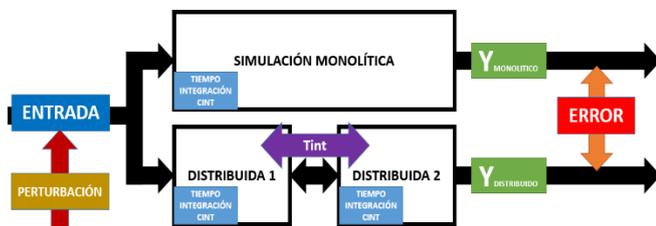


Figura 9: Comportamiento de variable de simulación monolítica y distribuida. Error para Tint=CINT

El valor perturbado de esta variable, así como el intervalo temporal en el que se introduce la perturbación, queda recogido en la tabla 1. Fuera de los intervalos reflejados, el valor que toma la variable de entrada viene dado por defecto.

Tabla 1: Perturbaciones para tiempo de intercambio fijo.

Intervalo (s)	Valor (m) (%)
[50,200]	0.35 m (50%)
[300,400]	0.35 m (50%)
[500,600]	0.35 m (50%)
[1000,1500]	0.07 m (10%)
[2000,2200]	1.75 m (250%)
[3400,3500]	2,10 m (300%)

Se obtuvo una comparativa para una variable de la simulación monolítica y su variable equivalente en la simulación distribuida, para dos tiempos de intercambio diferentes. Al disponer de una simulación monolítica en un único servidor OPC UA y una simulación distribuida en dos servidores, se comparó primero el comportamiento de la herramienta de simulación para una variable del primer servidor. Para cada una de las simulaciones realizadas se obtuvo en primer lugar la representación del valor de la variable correspondiente, así como los intervalos temporales en los cuales el error supera un umbral determinado. Las simulaciones del comportamiento dinámico de la variable del primer servidor distribuido se muestran en la figura 10 y la figura 12. En las figuras 11 y 13 se obtuvieron los intervalos de tiempo en los que el error normalizado fue superior a la tolerancia especificada.

3.2.1.1. Simulación Tint=CINT, servidor distribuido 1

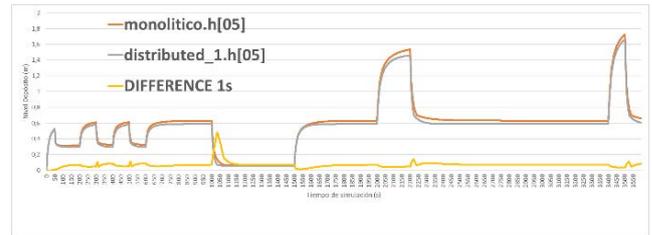


Figura 10: Dinámica simulación monolítica y distribuida. Error. Tint=CINT.

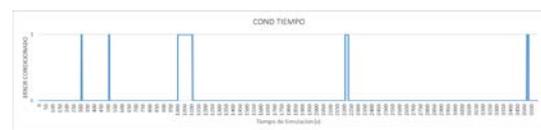


Figura 11: Intervalos error superior 10%. Tint=CINT

3.2.1.2. Simulación Tint=2CINT, servidor distribuido 1

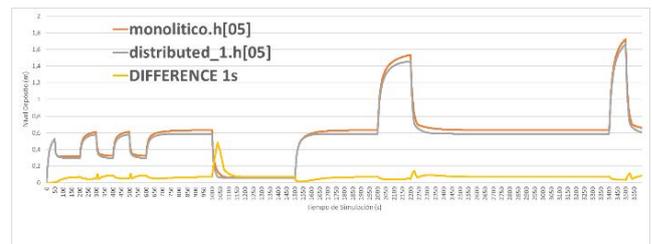


Figura 12: Dinámica simulación monolítica y distribuida. Error. Tint=2CINT

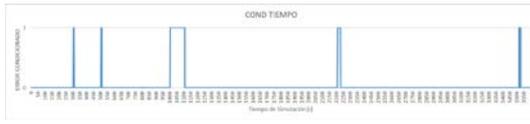


Figura 13: Intervalos error superior 10%. $T_{int}=2C_{INT}$

Posteriormente se obtuvo el comportamiento dinámico para una variable del segundo servidor, y se compararon con la variable equivalente de la simulación monolítica. En las figuras 14 y 16 se observa el comportamiento dinámico para dos tiempos de intercambio diferentes, mientras que en las figuras 15 y 17 se observan los intervalos temporales en los que el error está por encima de la tolerancia.

3.2.1.3. Simulación $T_{int}=C_{INT}$, servidor distribuido 2

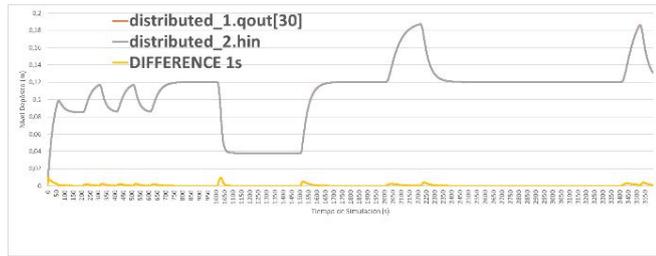


Figura 14: Dinámica simulación monolítica y distribuida. Error. $T_{int}=C_{INT}$.



Figura 15: Intervalos error superior 10%. $T_{int}=2C_{INT}$

3.2.1.4. Simulación $T_{int}=2C_{INT}$, simulador distribuido 2

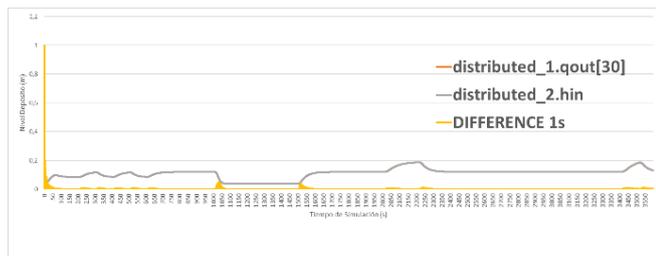


Figura 16: Dinámica simulación monolítica y distribuida. Error. $T_{int}=2C_{INT}$.

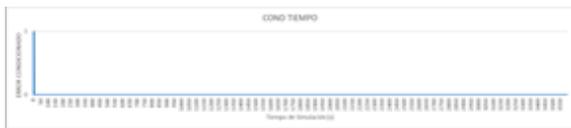


Figura 17: Intervalos error superior 10%. $T_{int}=2C_{INT}$

3.2.1.5. Comparativa de errores para diferentes T_{int}

Para la comparación de los errores normalizados con el aumento de la diferencia de los tiempos de intercambio y el tamaño de paso, se obtuvieron las gráficas de error normalizado para tres tiempos de intercambio fijo diferentes. Los resultados se muestran en las figuras 18, 19 y 20.

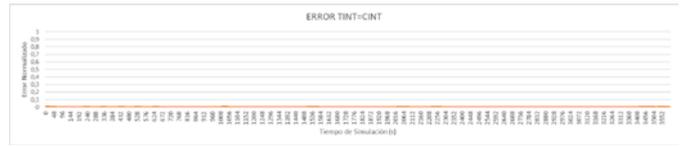


Figura 18: Error normalizado para $T_{INT}=C_{INT}$



Figura 19: Error normalizado para $T_{INT}=2C_{INT}$

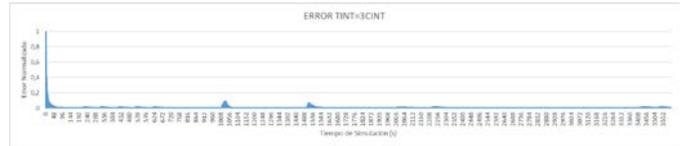


Figura 20: Error normalizado para $T_{INT}=3C_{INT}$

3.2.2. Simulaciones con variación del tamaño de paso.

Además, se realizaron simulaciones de referencia para la evaluación del algoritmo de control diseñado. Para evitar un largo tiempo de ejecución, se obtuvo en primer lugar una simulación más corta, de referencia, para un tiempo de intercambio el doble del tiempo de integración del modelo con una serie de perturbaciones diferenciadas, primero con tiempo de intercambio fijo y posteriormente con una variación dinámica. Las perturbaciones se muestran en la tabla 2.

Tabla 2: Perturbaciones introducidas en simulación sin variación de tiempo de intercambio.

Intervalo (s)	Valor (m) (%)
[10,20]	0.35 m (50%)
[30,40]	1.40 m (200%)
[50,60]	0.035 m (5%)
[70,80]	0.007 m (1%)
[90,100]	0.231 m (33%)

Una vez definidas las perturbaciones, se llevaron a cabo dos simulaciones diferentes, para una variable del segundo servidor distribuido, en el cual el tiempo de intercambio tiene una mayor influencia en el error.

En la primera de ellas, el tiempo de intercambio entre servidores permaneció fijo, mostrando en la figura 21 el comportamiento dinámico de la variable representada, y en la figura 22 el error relativo. Posteriormente se llevó a cabo la misma simulación, con las mismas perturbaciones, pero esta vez seleccionando un control del tiempo de intercambio. El comportamiento dinámico para la variable se muestra en la figura 23 y el error normalizado en la figura 24. En ambas simulaciones se comparó la variable equivalente del servidor distribuido con la simulación monolítica, como respuesta a los saltos introducidos en forma de perturbación.

3.2.2.1. Simulación de $T_{int}=2C_{INT}$, T_{int} fijo

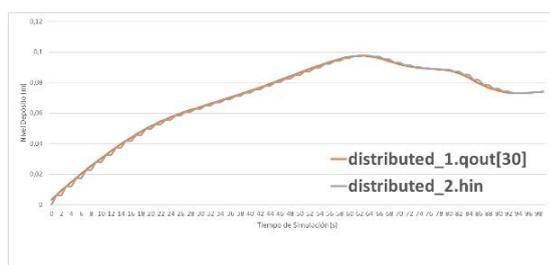


Figura 21: Dinámica variable simulación distr. Tint fijo



Figura 22: Error Normalizado Tint fijo.

3.2.2.2. Simulación de $T_{int} = 2C_{INT}$, T_{int} variable

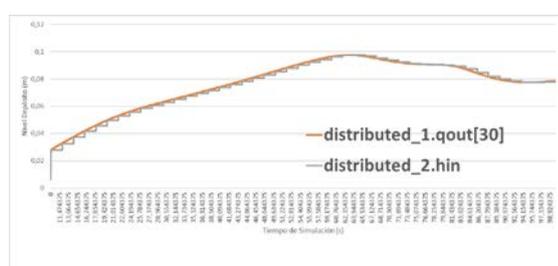


Figura 23: Dinámica variable simulación distr. Tint variable



Figura 24: Error Normalizado Tint variable.

4. Conclusiones

Hasta ahora se dispone de una estructura de simulación y control programada en un entorno de código abierto basada en librerías de PYTHON.

En cuanto al análisis del error cometido entre la simulación monolítica y la distribuida, es posible ver que el comportamiento de la variable del primer servidor de la simulación distribuida es idéntico para ambos tiempos de intercambio. Un aumento entre la diferencia de los tiempos de integración y el tiempo de intercambio no afecta al error, manteniéndose durante toda la simulación por debajo del umbral de tolerancia.

Sin embargo, al aumentar la diferencia entre el tiempo de intercambio y el tiempo de integración de cada uno de los servidores, se observa claramente que, si bien el comportamiento dinámico es similar, el error normalizado entre ambas simulaciones aumenta. Este hecho se hace patente al incrementar aún más la diferencia entre el tiempo de intercambio y el tiempo de integración del modelo, observándose con claridad que el comportamiento dinámico de la simulación es el mismo, que el comportamiento del error normalizado también es similar, pero incrementándose

de forma sensible tanto las diferencias como los intervalos temporales en los cuales se supera la tolerancia máxima preestablecida para del error.

En cuanto a la comparación de los resultados obtenidos mediante la aplicación del algoritmo de control, puede comprobarse cómo el comportamiento del error se reduce entre la simulación llevada a cabo sin la variación del tamaño de paso y la simulación mediante la variación en función de los valores del error. Así, se alcanzan valores de error normalizado inferiores cuando se lleva a cabo una variación del tamaño de paso. Se observa también claramente el compromiso del equilibrio entre el tiempo de simulación y el control del tiempo.

Para futuras líneas de investigación se abre un amplio abanico de posibilidades de mejora. En primer lugar la necesidad de eliminar el uso de la simulación monolítica y proceder a estimar el error de otra manera. Los problemas futuros radicarán en el paso de un modelo asumible a un modelo de mayor entidad, con diversos intercambios de datos entre las diferentes partes que lo constituyen. Se abre también la posibilidad de mejora de alguno de los algoritmos planteados en el presente artículo, en particular el añadir nuevas variables de control del tamaño de paso, de tal forma que el intercambio se produzca sólo cuando se alcancen ciertas condiciones en cuanto al error aportado. Otra posibilidad de mejora se plantea a la hora de realizar simulaciones de forma continua con un tamaño de paso muy pequeño, en ocasiones en las que el error siga aumentando y el tamaño de paso reduciéndose.

Mediante el desarrollo de DSM-UA se salva además el procedimiento farragoso del empleo de pasarelas que intercedan entre servidores OPC DA y las posibilidades que ofrece OPC UA. Si bien existen multitud de versiones de software pasarela, las posibilidades que ofrecen en cuanto a realizar una simulación programada son más bien escasas, con el añadido de suponer además un coste económico. Un inconveniente del manejo de pasarelas entre diferentes tipos de OPC es también una incongruencia dentro de la propia filosofía de implantación de OPC UA, donde se pretende la universalización de métodos de intercambio de información.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado con ayuda del Ministerio de Ciencia e Innovación, con ref. PGC2018-099312-B-C31 y cofinanciado por la Unión Europea a través del FEDER. El segundo y tercer autor agradecen el apoyo de la Junta de Castilla y León y EU/FEDER (CLU 2017-09).

Referencias

- [1] Cellier, F.E., Kofman, E., 2006. Continuous system simulation, Continuous System Simulation. <https://doi.org/10.1007/0-387-30260-3>
- [2] Alves R., De Prada C., Normey-Rico J., Merino A. y Acebes L.F. OPC based distributed real time simulation of complex continuous processes. Simulation Modelling Practice and Theory 13. 2005. Páginas 525-549.
- [3] Merino A, Pelayo S., Rueda A., Alves R., García A., Acebes F., de Prada C., Gutiérrez G. y García M. Un simulador de alcance total para la formación de los operarios de sala de control de factorías azucareras. 2ª Reunión de Usuarios de EcosimPro, UNED, Madrid. 2003
- [4] Merino, A.; Acebes, L. F.; Mazaeda, R.; De Prada, C. Modelado y Simulación del proceso de producción del azúcar. Revista Iberoamericana de Automática e Informática Industrial. 2009, pp. 21-31.

Resumen

En este trabajo se presenta el desarrollo de una plataforma experimental, denominada *Robotic Park*, enfocada al desarrollo de experiencias en el ámbito del control y robótica. La arquitectura software se ha desarrollado en ROS2 para facilitar la integración de diferentes agentes al sistema de forma descentralizada. El sistema de posicionamiento global basado en cámaras utiliza el Tracker 3.9 de Vicon que capta el movimiento con una exactitud de mm mediante marcadores reflectantes.

Como experiencia, se desarrolla una aplicación del problema clásico líder-seguidor con diferentes agentes. En este caso, los agentes son nanocuatricópteros Crazyflie 2.1. La comunicación entre agentes se lleva a cabo a través del nodo que realiza la comunicación con el dongle que controla los crazyflies. La transmisión de señales de referencia entre agentes se implementa basada en eventos para reducir el tráfico en la comunicación. Como se muestra en la sección de resultados, se consigue una reducción del 95.47% en la comunicación sin deterioro en la respuesta de control.

1. Introducción

En las últimas décadas la robótica de enjambres ha tenido un gran auge para la resolución de problemas del mundo real (Majid et al., 2022). La mejora tecnológica, reducción de costes y la aparición de una mayor variedad de robots han propiciado que se reduzcan las barreras de entrada a este sector (Chung et al., 2018). Dentro de este ámbito, el mayor desarrollo se encuentra en aquellos sistemas en los que los robots son heterogéneos. Las principales ventajas de estas configuraciones se traducen en un incremento de la eficacia (mayor cantidad de recursos), de la eficiencia (mayor variedad de recursos permite optimizar la distribución de tareas), de la capacidad de adaptación al entorno y tolerancia a fallos (Roldán-Gómez et al., 2020). Cualquiera de estas ventajas está directamente relacionada principalmente con dos aspectos: la comunicación y el control. (Wen et al., 2018).

Bien es cierto que el campo de mayor interés para los enjambres de robots es en entornos de exterior en tareas como exploración urbana (Nestmeyer et al., 2017), búsqueda y rescate (Kruijff-Korbayová et al., 2021), vigilancia costera (Lesire et al., 2016), intervenciones en desastres (Roldán et al., 2019), agricultura (Albiero et al., 2022) o exploración espacial (Nguyen et al., 2019). No obstante, suele ser conveniente la experiencia previa en entornos más controlados que permitan la validación de estrategias de forma previa para evitar incidentes en entornos más complejos. Como respuesta ante esta necesidad surgen las plataformas experimentales para el desarrollo de sistemas multi-robot. Las plataformas más simples que permiten el desarrollo y validación de algoritmos sin prácticamente coste son los simuladores. Estos entornos permiten trabajar con cualquier sistema en casi cualquier escenario sin poner en riesgo elementos físicos. Además, muchos de los entornos más extendidos en la actualidad forman parte de plataformas de código abierto, por lo que hay una comunidad muy amplia que brinda un gran apoyo para el desarrollo y extensión del uso de las distintas herramientas (Panerati et al., 2021). Con esta filosofía, la misma compañía que creó ROS (*Robot Operating System*)

ha desarrollado Gazebo (De Melo et al., 2019), el entorno de simulación más utilizado.

Actualmente hay gran cantidad de plataformas experimentales para realizar ensayos en enjambres. Esto se debe a la gran heterogeneidad existente entre los robots y su correspondiente sensorización, sistemas de captura de movimiento empleados o entornos enfocados a ciertas misiones (Schranz et al., 2020). Entre las más extendidas son las que emplean robots terrestres diferenciales (Allen et al., 2020; Wilson et al., 2016). Una plataforma multirobot para investigación y educación accesible de forma remota es el laboratorio desarrollado por GeorgiaTech, *Robotarium* (Wilson et al., 2020). El caso de los robots aéreos supone un nivel adicional en la complejidad de control ya que se desplazan en un espacio 3D (Preiss et al., 2017; Beuchat et al., 2019; Socas et al., 2021). Casos menos frecuentes son los que combinan sistemas heterogéneos o incluso robots que dispongan de configuración terrestre y aéreas (Araki et al., 2017).

En este trabajo se presenta una plataforma experimental para sistemas multiagente heterogéneos (robots aéreos y diferenciales). Como experiencia real, se lleva a cabo una secuencia de ensayos donde se aplica el protocolo líder-seguidor para un sistema de tres agentes aéreos. La formación del enjambre se establece mediante un vector de posición relativa entre cada seguidor y su agente líder. Estos ensayos se caracterizan por implementar un criterio de comunicación entre agentes basado en eventos (Guerrero-Castellanos et al., 2019). El desempeño del sistema se ha evaluado para un criterio de comunicación continuo y otro basado en eventos con una condición de disparo basada en la variación de la posición del agente líder respecto de la última consigna generada.

El presente trabajo se estructura de la siguiente manera. En la sección 2 se describe la plataforma actualmente en desarrollo. A continuación, en la sección 3 se presenta brevemente uno de los agentes que forman parte de esta plataforma, el cuadricóptero Crazyflie 2.X. En la sección 4 se describe la experiencia realizada para este trabajo, cuyos resultados se reflejan en la sección 5. Finalmente, en la sección 6 se presentan las conclusiones del trabajo, así como algunas posibles líneas de actuación futuras.

* Autor para la correspondencia: fjmanas@dia.uned.es

2. Plataforma experimental

En esta sección se describen los distintos componentes que conforman la plataforma experimental desarrollada. Esta plataforma recibe el nombre de *Robotic Park*, y está concebida para el desarrollo de experiencias de control y robótica en el ámbito de la investigación y de la educación. El sistema se ha implementado en ROS2 (*Robotic Operating System 2*) en su distribución *Galactic*. Se ha decidido este modelo para poder aprovechar la versatilidad que ofrece su arquitectura distribuida, de forma que cualquier agente que se conecte a la red del laboratorio puede tener acceso directo a todos los nodos y *topics* del sistema. De esta manera, el escalado del sistema se simplifica ya que los nuevos agentes solo requieren una conexión a la red y soporte para los lenguajes C++ o Python. En Figura 1 se muestra una imagen general de la plataforma experimental.

En la Figura 2 se muestra el diagrama de la arquitectura que actualmente implementa la plataforma. Sus principales componentes son:

1. Crazyflie 2.1. Son los agentes que actualmente se encuentran disponibles para la realización de experiencias. Un sólo dongle USB, Crazyradio PA, permite la comunicación de hasta 15 unidades con el PC a través de una sola antena.
2. Ordenadores personales (PC). El laboratorio está equipado con dos PCs sobre los que se ejecuta el sistema. El primero de ellos tiene instalado el sistema operativo Windows 10 y es el que tiene instalado el software para el sistema de posicionamiento. El segundo PC tiene instalado el sistema operativo Ubuntu 20.04 y es el encargado de soportar la comunicación con los robots.
3. Marcadores reflectantes. Para que el software de posicionamiento empleado sea capaz de determinar la posición y orientación exacta del robot precisa de cinco marcadores por robot, distribuidos de forma asimétrica. Es posible usar menos marcadores y con una distribución simétrica. En este caso, sólo sería posible emplear los datos de posición y la distribución debe ser diferente entre robots.
4. Software de posicionamiento. El software utilizado es Tracker 3.9 de Vicon y opera a 100Hz.
5. Cámaras. Se emplean un total de seis cámaras Vero v2.2 conectadas al software de posicionamiento mediante un switch ethernet.
6. Arquitectura de control en ROS2. El control de posición de los crazyflie se realiza en su microcontrolador mientras que la gestión de las trayectorias de cada agente se realiza en el PC mediante un nodo de ROS2. La adquisición del sistema de posicionamiento también se realiza mediante el correspondiente nodo que emplea el SDK del software Tracker de Vicon.

2.1. Sistema de posicionamiento

En cualquier sistema, la realimentación supone un factor crítico para la desarrollo de una arquitectura de control eficiente. Para el caso del control de posición de los robots, la realimentación se compone de la posición y orientación de estos



Figura 1: Laboratorio *Robotic Park*.

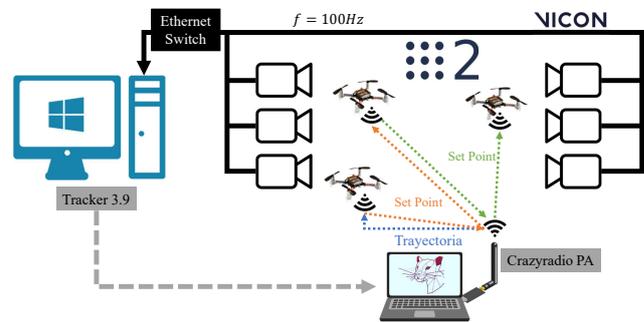


Figura 2: Arquitectura de comunicación en *Robotic Park*.

(seis grados de libertad). Los métodos de posicionamiento pueden ser internos (mediante IMUs, sensores de distancia, flujo óptico, etc) o externos (mediante marcadores reflectantes y visión, infrarrojos, UWB, etc). En la mayoría de los casos, la posición 3D de un robot no suele estar dada por un solo sistema de posicionamiento. Para aprovechar los beneficios de cada uno y salvar sus peores características, se suelen emplear combinaciones de distintos sistemas por los cuales, mediante mecanismos como el filtro de Kalman, se puede obtener una mejor estimación de la posición real del robot.

Muchos robots tienen sus propios sistemas de posicionamiento, como son en el caso del crazyflie el “Loco Positioning System” o “Lighthouse positioning System”. En nuestro caso, al tratarse de una plataforma que opera con combinaciones de robots heterogéneos, interesa disponer de sistemas de posicionamiento compatibles con distintas arquitecturas de robots. Como la plataforma experimental se desarrolla en interior con un volumen de trabajo 2m-2m-2,5m, un buen sistema de posicionamiento compatible con la mayoría de robots sin requerir modificaciones en su firmware es mediante visión haciendo uso de marcadores reflectantes. El sistema de posicionamiento de Vicon está compuesto por un total de 6 cámaras ethernet Vero v2.2, el software de captura de movimiento Tracker 3.9, la vara de calibración y un interruptor PoE (D-Link DGS-1026MP 26 puertos Gigabit Max PoE). Las cámaras tienen una velocidad de respuesta de hasta 330 frames por segundo y una resolución de 2,2 megapíxeles que permiten la correcta detección de marcadores de hasta 6.5mm en todo el volumen de trabajo.

A partir de los puntos detectados en cada cámara, el software Tracker 3.9 determina la asociación de cada marcador con los objetos/robots definidos y estima su posición y orientación global. Estos datos se introducen en la red de ROS2 a través del correspondiente nodo que haciendo uso del SDK oficial, publica los datos en su correspondiente *topic* con la tipología estándar “*geometry_msgs/Pose*”. En ese instante, los datos ya están disponibles para sus distintos usos en la red: mostrarse en una interfaz gráfica, registrarlos, emplearse en problemas de gestión de trayectorias, enviarse a los robots para incluirlos en sus estimadores basados en filtros de Kalman, etc.

2.2. Arquitectura software en ROS2 Galactic

La comunicación entre los distintos componentes de la plataforma se realiza a través de ROS2 en su distribución Galactic. Se ha decidido implementar el sistema en ROS2 al tratarse de un sistema de código abierto con una gran extensión en el mundo de la robótica. ROS2 permite una descentralización que no era posible con ROS. Cada nodo puede “anunciarse” a sí mismo en la red y comunicarse con otros nodos y *topics* siempre que compartan el mismo *ROS_DOMAIN_ID*. En la Figura 3 se puede observar un ejemplo de la red de nodos y *topics* en ROS2 para la ejecución del problema líder-seguidor con 3 drones.

2.3. Simulador

Para poner en marcha cualquier sistema experimental, se requiere una herramienta que permita validar los desarrollos que se hacen antes de implementarse en el sistema real. Una de las principales ventajas de trabajar con ROS/ROS2 es que la misma arquitectura software que se implementa en simulación es perfectamente compatible con el sistema real siempre que los nodos trabajen con los mismos nombres de *topics*. De esta forma, para las simulaciones, se procuran crear nodos que reemplacen a los que interactúan con el sistema real para replicar ambos sistemas. Por ejemplo, el sistema de posicionamiento real se sustituye por un nodo que toma los valores del entorno de simulación y los publica a la red con la misma tipología, frecuencia y nombre que lo hace el sistema de posicionamiento. En este caso, por el alto grado de compatibilidad que ofrece con ROS/ROS2 se opta por trabajar con el entorno de simulación Gazebo. En la figura 4 se observa una captura de simulador durante un ensayo con un enjambre de 5 crazyflies.

3. Crazyflie 2.X

Para este trabajo, se presenta como agente de la plataforma el cuadricóptero Crazyflie 2.1, Figura 5. Crazyflie 2.X es una plataforma experimental de código abierto desarrollada por Bitcraze. Se trata de un micro vehículo aéreo a causa de su reducido tamaño (92x92x29mm) y su bajo peso (27g). Por sus características constructivas se trata de un robot adecuado para el vuelo en interiores y junto con la flexibilidad que ofrecen para su programación ha propiciado su auge como herramienta educativa y de investigación.

Crazyflie viene equipado con unos sensores básicos que le permiten estimar su posición tanto en el eje z (sensor de distancia VL53L1x) como en el plano xy (sensor de flujo óptico PMW3901). Sin embargo, este sistema de posicionamiento

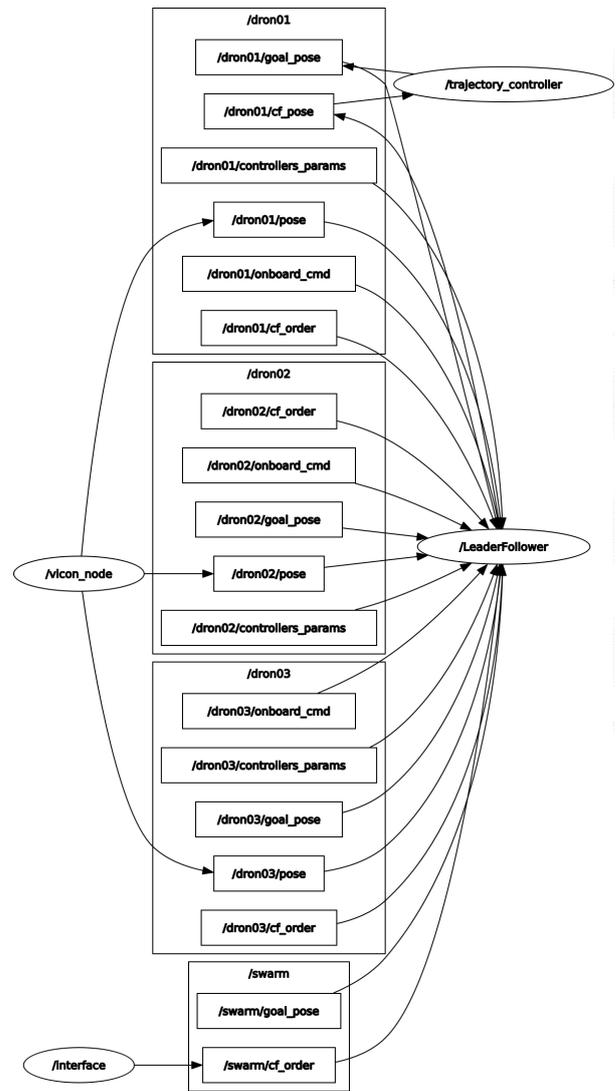


Figura 3: Captura de la red de ROS2 durante un experimento.

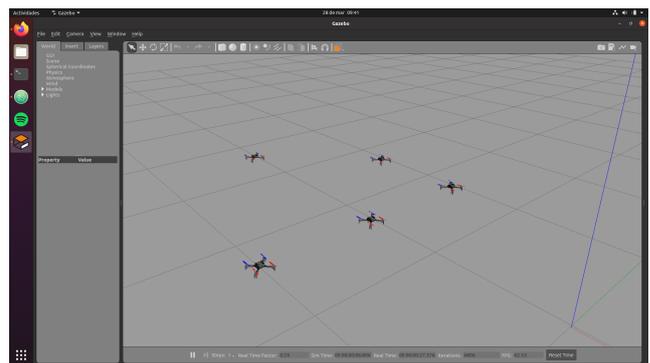


Figura 4: Entorno de simulación Gazebo.

básico no resulta demasiado preciso y normalmente es necesario introducir un sistema de posicionamiento global que permita inicializar la posición de dron y corregir los errores que acumula procedente del ruido de los sensores. Además, Crazyflie ofrece sensorización adicional (en lo que se denomina *decks*) que permite mejorar tanto su capacidad computacional como incorporar otros sistemas de posicionamiento.



Figura 5: Cuadricóptero Crazyflie 2.1.

La comunicación entre crazyflies y el PC se realiza a través de la antena crazyradio PA. Este componente dispone de una API escrita en python, *cflib*, de código abierto y disponible en Github*. Con esta API, el desarrollo del correspondiente nodo de ROS2 implica la importación de las clases necesarias para cada modo de funcionamiento. De esta forma, se encuentra disponible tanto el poder ejecutar todo el control en el microcontrolador del crazyflie o como el extraer distintos niveles de control para ejecutarlos “Off-Board”. Para todos los casos, debe tenerse presente en cada lazo de control los posibles retardos introducidos por el canal de comunicación empleado.

4. Control de formaciones por protocolo líder-seguidor

El protocolo líder-seguidor para el control de formaciones es uno de los problemas más abordados en el ámbito de los sistemas multiagente (Ge, 2021). En ellos, el líder o líderes del sistema son los que conocen las consignas o trayectorias deseadas, mientras que los “seguidores” lo que reciben es información relativa a otros agentes del sistema. El control distribuido de estos sistemas implica el diseño de protocolos de comunicación, y por tanto, aspectos como la topología y sus cambios o la influencia de los retardos de la comunicación pueden afectar al desempeño del sistema.

Considérese un sistema de N agentes con posición $p_i \in \mathbb{R}^3$, y sin pérdida de generalidad, un líder cuyo estado denotamos como $p_0 \in \mathbb{R}^3$. El líder debe seguir una consigna $\gamma \in \mathbb{R}^3$, mientras que el resto de los agentes trata de mantener unas posiciones relativas entre sí a la vez que hace seguimiento del líder, según establezca la topología del sistema. Supóngase que cada agente i sólo recibe información relativa a un subconjunto de agentes j que denotamos como $j \in \mathcal{N}_i$ y la posición relativa deseada entre ellos la denotamos como p_{ij}^* . Por tanto, el objetivo de control se resume en

$$p_0(t) = \gamma(t) \quad (1)$$

$$p_i - p_j = p_{ij}^* \quad \forall j \in \mathcal{N}_i. \quad (2)$$

En este trabajo, se implementa esta tarea incorporando un sistema de comunicación basada en eventos para la comunicación entre agentes (Jain et al., 2018). La estrategia basada en eventos se presenta como una alternativa al muestreo de señales periódico, y consiste en transmitir información sólo cuando haya

cambios significativos en la señal que se evalúa, en el caso de aplicación de este trabajo, la posición p_i . En los últimos años estas estrategias de control han experimentado un gran auge dentro de los sistemas ciberfísicos ya que permiten optimizar el uso de recursos, como el consumo en agentes alimentados por baterías de baja capacidad (Aranda-Escolástico et al., 2020).

La determinación de cuándo se produce un nuevo envío se realiza mediante lo que se denomina condición de disparo que denotamos por f_i para el agente i . Sea $\{t_k^i, k \in \mathbb{N}\}$ los instantes de tiempo a los que se produce un evento en el agente i . Estos se pueden determinar de manera recursiva como

$$t_{k+1} = \inf\{t > t_k^i : f_i > 0\}. \quad (3)$$

La función de disparo utilizada en este trabajo es la que se conoce como “send-on-delta” Miskowicz (2006):

$$f_i(e_i(t)) = \|e_i(t)\| - c_0^i, \quad (4)$$

donde $e_i(t) = p_i(t) - p_i(t_k^i)$, es decir, la diferencia entre la posición actual y la última posición transmitida, y $c_0^i \in \mathbb{R}_{>0}$.

5. Resultados

Para la evaluación de la plataforma (secciones 2-3) se ha implementado el control cooperativo explicado en la sección 4. Se considera un sistema de 3 drones (*dron01*, *dron02*, *dron03*) con la topología que se muestra en la Figura 6 y con un líder (*dron01*).

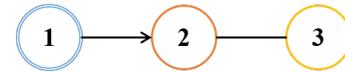


Figura 6: Topología del sistema de tres agentes.

Se evalúa el desempeño en tres situaciones relativas a la comunicación entre los drones:

- Continua con un periodo de 50 ms.
- Basada en eventos con umbral $c_0^i=5$ en la ecuación (4).
- Basada en eventos con umbral $c_0^i=10$ en la ecuación (4).

La trayectoria γ predefinida como referencia para el agente líder 1 es un cuadrado con un valor de 0,5 m de lado. Esta figura se ejecuta a una altura de 1 m sobre la horizontal y toma como referencia para el plano X-Y la posición inicial de *dron01*. De acuerdo con la Figura 6, *dron01* recibirá la trayectoria de referencia y le enviará su posición a *dron02*. Así mismo, *dron02* y *dron03* se comunicarán entre sí. Además, la formación deseada requiere mantener unas posiciones relativas dadas por:

$$p_{12} = (0,25 \ 0,25 \ 0,1)^T, \quad p_{23} = (0,25 \ 0,25 \ 0,1)^T.$$

En la Figura 7 se muestran las trayectorias en el espacio 3D realizadas por cada agente. No se representan los tres casos en cuanto a la comunicación porque la respuesta obtenida es semejante y dificultaría la visualización conjunta de las trayectorias, sino solo el caso por eventos con umbral $c_0^i = 10$. Se observa como las posiciones relativas deseadas se mantienen y se sigue la consigna. Al igual que en el caso de las trayectorias, el resultado obtenido al analizar la dinámica en los ejes X, Y y Z es

*<https://github.com/bitcraze/crazyflie-lib-python>

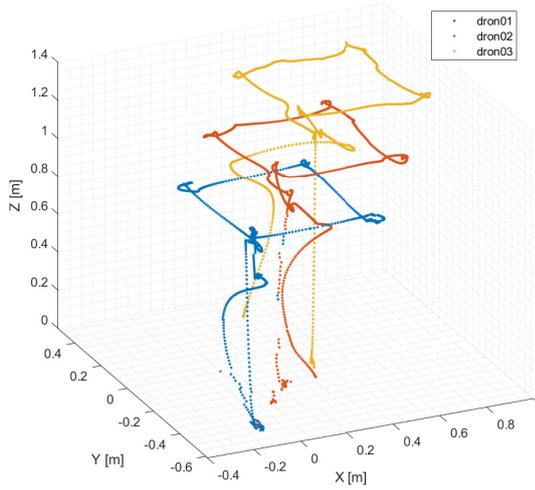


Figura 7: Trayectorias realizadas por los distintos agentes.

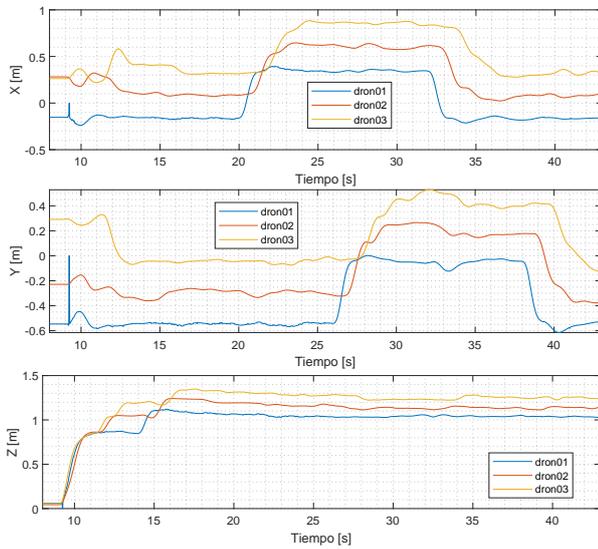


Figura 8: Movimiento de los agentes separado por ejes.

similar en todos los ensayos, variando el retardo entre señales. Para el caso continuo, el retardo es causado por el canal de comunicación y alcanza un valor de 0,6 s. Para el caso basado en eventos con umbral de $c_0^i = 5$ y $c_0^i = 10$, el retardo alcanza el valor 0,8 s y 1,0 s respectivamente. Este comportamiento es el esperado y no repercute negativamente en el comportamiento de los agentes. La dinámica observada es similar en los tres casos. En la figura 8 se muestra la comparativa del movimiento de los tres agentes disgregados por eje en el caso del umbral de disparo de $c_0^i = 10$.

Para obtener un análisis objetivo de los resultados obtenidos se procede a estudiar el error obtenido en la conservación de la posición relativa entre agentes para cada eje, es decir, cada componente de $p_i - p_j - p_{ij}^*$ a lo largo del tiempo. En trazo continuo se representan los datos relacionados con el ensayo con comunicación periódica (P). Mediante el trazo “-.-” se representan los datos para el caso basado en eventos con un umbral de $c_0^i = 5$ (BE5). Finalmente con el trazo “-.-” se representan los datos obtenidos para el caso con el umbral establecido en $c_0^i = 10$ (BE10). En lo referente a los colores, los trazos azules representan la relación “dron01-dron02” y el trazo rojo la

relación “dron02-dron03”. En la Figura 9 se muestran los resultados obtenidos. Los parámetros estadísticos, valor medio y desviación estandar ($\mu \pm \sigma$), se reflejan en la tabla 1.

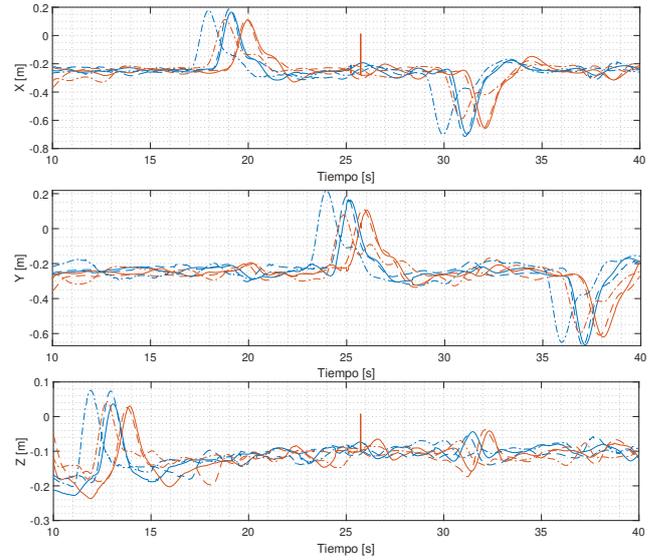


Figura 9: Posición relativa entre agentes.

Relación	P[m]	BE5[m]	BE10[m]
(01 - 02) _X	-0,25 ± 0,10	-0,25 ± 0,11	-0,25 ± 0,10
(01 - 02) _Y	-0,24 ± 0,09	-0,24 ± 0,09	-0,24 ± 0,11
(01 - 02) _Z	-0,11 ± 0,04	-0,11 ± 0,04	-0,10 ± 0,03
(02 - 03) _X	-0,25 ± 0,09	-0,25 ± 0,09	-0,25 ± 0,09
(02 - 03) _Y	-0,25 ± 0,09	-0,26 ± 0,09	-0,25 ± 0,09
(02 - 03) _Z	-0,11 ± 0,04	-0,11 ± 0,03	-0,11 ± 0,03

Tabla 1: Resultados analíticos.

En cuanto a la cantidad de mensajes generados para la comunicación entre agentes, en la Figura 10 se muestra un ejemplo de cómo el empleo del umbral reduce la cantidad de mensajes intercambiados por los agentes. En la tabla 2 se muestran la cantidad de mensajes que generan los agentes *dron01* y *dron02* en cada caso.

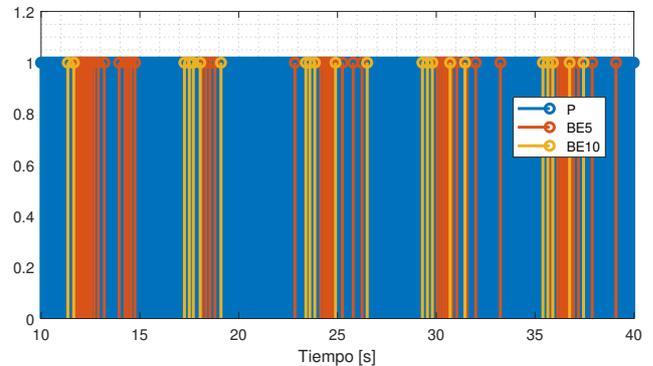


Figura 10: Periodo entre consignas de referencia.

Se debe tener en cuenta que cada mensaje tiene una estructura del tipo *geometry_msgs/Pose*. Este tipo de mensajes se componen de 7 parámetros del tipo float64, por lo que se requieren

Líder	P	BE5	BE10
dron01	928	69	42
dron02	930	94	57

Tabla 2: Número de mensajes transmitidos.

un total de 56 bytes para la transmisión de la consigna completa. Si se omite la orientación del agente, se puede reducir a sólo tres parámetros y por tanto sólo se precisarían 24 bytes para la transmisión del mensaje.

6. Conclusiones

A partir de los resultados mostrados se puede observar que la estrategia de comunicación basada en eventos es adecuada ya que consigue resultados equivalentes a la comunicación periódica consiguiendo una reducción en la transmisión de consignas de posición de hasta un 95.47% con un umbral de generación de eventos de $c_0^i = 10$. Esta reducción tan significativa de la comunicación es posible gracias a la estabilidad en el comportamiento que se consigue con los controladores internos que implementan los crazyflie. Esta estabilidad en su operación hace que una vez el agente líder alcance una posición objetivo, no salga de su esfera umbral hasta recibir nuevas consignas.

Como continuación al trabajo expuesto, las futuras líneas de trabajo se desarrollarán explotando las capacidades que ofrece la plataforma. Algunos ejemplos son el desarrollo de estrategias de control multiagente basadas en eventos para sistemas heterogéneos, estudio de precisión para distintos sistemas de posicionamiento (captura de movimiento por visión, vSLAM, UWB, etc) o experimentación mediante sistemas híbridos que combinen robots reales con simulados.

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado en parte por la Agencia Estatal de Investigación (AEI) mediante el proyecto PID2020-112658RB-I00/AEI/10.13039/501100011033.

Referencias

- Albiero, D., Garcia, A.P., Umezu, C.K., de Paulo, R.L., 2022. Swarm robots in mechanized agricultural operations: A review about challenges for research. *Computers and Electronics in Agriculture* 193, 106608.
- Allen, J.M., Joyce, R., Millard, A.G., Gray, I., 2020. The Pi-puck Ecosystem: Hardware and Software Support for the e-puck and e-puck2, in: *International Conference on Swarm Intelligence*, pp. 243–255.
- Araki, B., Strang, J., Pohorecky, S., Qiu, C., Naegeli, T., Rus, D., 2017. Multi-robot path planning for a swarm of robots that can both fly and drive, in: *2017 IEEE International Conference on Robotics and Automation (ICRA)*, pp. 5575–5582.
- Aranda-Escolástico, E., Guinaldo, M., Heradio, R., Chacon, J., Vargas, H., Sánchez, J., Dormido, S., 2020. Event-based control: a bibliometric analysis of twenty years of research. *IEEE Access* 8, 47188–47208.
- Beuchat, P.N., Stürz, Y.R., Lygeros, J., 2019. A teaching system for hands-on quadcopter control. *IFAC-PapersOnLine* 52, 36–41.
- Chung, S.J., Paranjape, A.A., Dames, P., Shen, S., Kumar, V., 2018. A survey on aerial swarm robotics. *IEEE Transactions on Robotics* 34, 837–855.
- De Melo, M.S.P., da Silva Neto, J.G., Da Silva, P.J.L., Teixeira, J.M.X.N., Teichrieb, V., 2019. Analysis and comparison of robotics 3d simulators, in: *2019 21st Symposium on Virtual and Augmented Reality (SVR)*, pp. 242–251.
- Ge, S., 2021. A survey and a simple simulation of leader-follower formation control with MatLab, in: *2021 3rd International Symposium on Robotics & Intelligent Manufacturing Technology (ISRIMT)*, pp. 127–130.
- Guerrero-Castellanos, J.F., Vega-Alonzo, A., Durand, S., Marchand, N., Gonzalez-Diaz, V.R., Castañeda-Camacho, J., Guerrero-Sánchez, W.F., 2019. Leader-following consensus and formation control of VTOL-UAVs with event-triggered communications. *Sensors* 19, 5498.
- Jain, R.P., Aguiar, A.P., de Sousa, J.B., 2018. Cooperative path following of robotic vehicles using an event-based control and communication strategy. *IEEE Robotics and Automation Letters* 3, 1941–1948.
- Kruijff-Korbayová, I., Grafe, R., Heidemann, N., Berrang, A., Hussung, C., Willms, C., Fettke, P., Beul, M., Quenzel, J., Schleich, D., et al., 2021. German Rescue Robotics Center (DRZ): A Holistic Approach for Robotic Systems Assisting in Emergency Response, in: *2021 IEEE International Symposium on Safety, Security, and Rescue Robotics (SSRR)*, pp. 138–145.
- Lesire, C., Infantes, G., Gateau, T., Barbier, M., 2016. A distributed architecture for supervision of autonomous multi-robot missions. *Autonomous Robots* 40, 1343–1362.
- Majid, M., Arshad, M., Mokhtar, R., 2022. Swarm Robotics Behaviors and Tasks: A Technical Review. *Control Engineering in Robotics and Industrial Automation*, 99–167.
- Miskowicz, M., 2006. Send-on-delta concept: An event-based data reporting strategy. *sensors* 6, 49–63.
- Nestmeyer, T., Robuffo Giordano, P., Bülthoff, H.H., Franchi, A., 2017. Decentralized simultaneous multi-target exploration using a connected network of multiple robots. *Autonomous robots* 41, 989–1011.
- Nguyen, L.A., Harman, T.L., Fairchild, C., 2019. Swarmathon: a swarm robotics experiment for future space exploration, in: *2019 IEEE International Symposium on Measurement and Control in Robotics (ISMCR)*, pp. B1–3.
- Panerati, J., Zheng, H., Zhou, S., Xu, J., Prorok, A., Schoellig, A.P., 2021. Learning to fly—a gym environment with pybullet physics for reinforcement learning of multi-agent quadcopter control, in: *2021 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS)*, pp. 7512–7519.
- Preiss, J.A., Honig, W., Sukhatme, G.S., Ayanian, N., 2017. Crazyswarm: A large nano-quadcopter swarm, in: *2017 IEEE International Conference on Robotics and Automation (ICRA)*, pp. 3299–3304.
- Roldán, J.J., Peña-Tapia, E., Garcia-Aunon, P., Del Cerro, J., Barrientos, A., 2019. Bringing adaptive and immersive interfaces to real-world multi-robot scenarios: Application to surveillance and intervention in infrastructures. *Ieee Access* 7, 86319–86335.
- Roldán-Gómez, J., de León Rivas, J., Garcia-Aunon, P., Barrientos, A., 2020. Una revisión de los sistemas multi-robot: Desafíos actuales para los operadores y nuevos desarrollos de interfaces. *Revista Iberoamericana de Automática e Informática industrial* 17.
- Schranz, M., Umlauf, M., Sende, M., Elmenreich, W., 2020. Swarm robotic behaviors and current applications. *Frontiers in Robotics and AI* 7, 36.
- Socas, R., Dormido, R., Guinaldo, M., Dormido, S., 2021. A Control Engineering Framework for Quadrotors: An Application for the Crazyflie 2. X, in: *18th International Conference on Informatics in Control, Automation and Robotics*, pp. 359–366.
- Wen, J., He, L., Zhu, F., 2018. Swarm robotics control and communications: Imminent challenges for next generation smart logistics. *IEEE Communications Magazine* 56, 102–107.
- Wilson, S., Gameros, R., Sheely, M., Lin, M., Dover, K., Gevorkyan, R., Haberland, M., Bertozzi, A., Berman, S., 2016. Pheeno, a versatile swarm robotic research and education platform. *IEEE Robotics and Automation Letters* 1, 884–891.
- Wilson, S., Grotfelter, P., Wang, L., Mayya, S., Notomista, G., Mote, M., Egersstedt, M., 2020. The robotarium: Globally impactful opportunities, challenges, and lessons learned in remote-access, distributed control of multirobot systems. *IEEE Control Systems Magazine* 40, 26–44.

Modelado y control del proceso de producción de microalgas mediante estrategias de aprendizaje automático

Pablo Otálora^{*a}, José Luis Guzmán^a, Francisco Gabriel Acién^b, Manuel Berenguel^a

^aCIESOL-CeiA3, Departamento de Informática, Universidad de Almería. Ctra. Sacramento s/n, Almería 04120, España

^bCIESOL-CeiA3, Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Almería. Ctra. Sacramento s/n, Almería 04120, España

Resumen

La producción de microalgas a nivel industrial es un proceso atractivo, debido a sus múltiples aplicaciones, entre las que destaca el tratamiento de aguas residuales. Sin embargo, su marcado carácter biológico genera grandes dificultades a la hora de lograr la optimización del proceso. Esto implica la necesidad de grandes esfuerzos, tanto a la hora de obtener modelos descriptivos de diferentes aspectos del sistema, como para desarrollar estrategias de control que logren maximizar la productividad. Ante esta casuística, las técnicas de aprendizaje automático basadas en datos se presentan como una alternativa atractiva para atajar estos problemas. Este tipo de técnicas, cuando se encuentran respaldadas por un volumen suficiente de datos, son capaces de adaptarse adecuadamente a circunstancias diversas en problemas de elevada complejidad. Este trabajo tiene como objetivo el uso de técnicas basadas en datos para abordar el problema de optimización, modelado y control de la producción de microalgas, validando los resultados obtenidos tanto en simulación como en sistemas de producción reales.

Palabras clave: Producción de microalgas, Machine Learning, Redes neuronales, Raceway, Deep Learning

1. Introduction

El constante desarrollo y crecimiento de la sociedad contemporánea acarrea un notable incremento en la demanda de recursos fundamentales, como son la energía y el agua limpia. Del mismo modo, implica un aumento de emisiones de CO_2 , que trae consigo un incremento del efecto invernadero, con consecuencias muy negativas para el planeta. Estas cuestiones llevan a la sociedad a enfrentarse a un complejo problema de sostenibilidad ambiental y de recursos, haciendo prioritaria la búsqueda de soluciones a dichos problemas, o alternativas a las soluciones tradicionales.

La producción industrial de microalgas es una excelente opción en este contexto. Las microalgas son microorganismos fotosintéticos con capacidad para crecer y reproducirse en una gran variedad de entornos, sin necesidad de suelo fértil o agua limpia (Acien et al., 2017). Poseen una gran capacidad de producción de biomasa, por lo que son una potencial fuente de biocombustible (González-López et al., 2020). Su composición también resulta interesante para la obtención de productos de alto valor, como suplementos alimenticios, cosméticos o bioestimulantes (Pawlowski et al., 2019). Además, su capacidad de absorber nutrientes como fósforo, carbono o nitrógeno del medio en que se encuentran las convierte en una alternativa muy interesante frente a los problemas de tratamiento de aguas residuales y absorción de emisiones de CO_2 (Abdel-Raouf et al., 2012; Pittman et al., 2011).

Tradicionalmente, el proceso de producción se puede llevar a cabo de dos formas. Por un lado están los fotobiorreactores tubulares, compuestos por tuberías forzadas, a través de las cuales el medio en el que se encuentran las microalgas circula

siendo impulsado por una bomba (Fernández et al., 2014b). Poseen la ventaja de mantener el cultivo en condiciones óptimas, pudiendo controlar de forma sencilla la temperatura a la que se encuentra el cultivo, la luz que incide sobre este y el aporte de nutrientes. También evitan la entrada de contaminantes externos (Singh and Singh, 2015). A pesar de esto, su mayor coste y consumo de energía, unidos a su difícil escalabilidad, provocan que este tipo de producción únicamente sea empleado para la obtención de productos de alto valor, los cuales no toleran la presencia de contaminantes durante su proceso de producción.

Por otro lado, existen los reactores abiertos, más conocidos como *raceway*. Se trata de grandes piscinas por las que circula el medio con las microalgas, recibiendo la radiación necesaria del sol y encontrándose el cultivo a temperatura ambiente. Si bien en este tipo de producción el cultivo es más fácilmente contaminable, y las condiciones a las que se encuentra son más difíciles de optimizar (Barceló-Villalobos et al., 2019), su escalabilidad, sus bajos costes y su reducido consumo de energía provocan que la mayor parte de la producción mundial de biomasa de microalgas se lleve a cabo en este tipo de reactores (Chiaromonti et al., 2013; Sompech et al., 2012).

No obstante, la sostenibilidad de este proceso no es suficiente para justificar su uso en lugar de las alternativas tradicionales. La competitividad del proceso solo puede ser alcanzada mediante la maximización de la producción, optimizando el proceso en las fases de diseño y operación (del Rio-Chanona et al., 2019). Para lograr dicha optimización, es mandatorio tener un conocimiento exhaustivo del sistema, tanto a nivel biológico como dinámico. Sin embargo, la caracterización del sistema no es trivial, debido a su marcado carácter biológico (Franco et al., 2019). El proceso es muy complejo, no lineal y altamente variable a lo largo del tiempo, lo cual convierte el control de las variables de interés del proceso en un problema complicado (Guzmán et al., 2020).

* Autor para la correspondencia: p.otalora@ual.es

En la literatura, estos problemas han sido afrontados haciendo uso de modelos clásicos, como son los modelos basados en primeros principios o las funciones de transferencia en torno a un punto de operación obtenidas experimentalmente (Fernández et al., 2014a; García-Mañas et al., 2019). En base a estos, se han establecido estrategias de control clásicas, como control PID, MPC o todo-nada (Rodríguez-Miranda et al., 2019; Pawlowski et al., 2016). Problemas relacionados con la caracterización de otros aspectos del sistema, tales como la composición del cultivo, han sido tradicionalmente solventados mediante el análisis en microscopio por parte de un experto (Correa et al., 2017). Todas estas soluciones, aunque demuestran ser efectivas, resultan a menudo laboriosas, requieren de recalibraciones periódicas, o no son absolutamente eficientes (Heimann and Huerlimann, 2015).

Las estrategias de aprendizaje automático basadas en datos aportan un enfoque distinto ante este tipo de problemas. El extenso volumen de datos del que se dispone en la actualidad, junto al incremento de la capacidad computacional, fomentan enormemente el uso de este tipo de técnicas en una gran variedad de entornos, con gran éxito a la hora de adaptarse a problemas muy complejos (Núñez et al., 2020; Jordan and Mitchell, 2015). Estas técnicas se caracterizan por su capacidad para resolver problemas sin estar explícitamente programadas para ellos, extrayendo relaciones entre los datos de entrenamiento, aprendiendo de estos y adaptándose a otras circunstancias (Schmidhuber, 2015). Son muy empleadas en aplicaciones tan complejas y variadas como el reconocimiento de imágenes, recomendaciones de productos o el procesamiento de textos.

Las estrategias de aprendizaje automático no están siendo muy utilizadas en el ámbito de la producción de microalgas (Supriyanto et al., 2019), a pesar de que a priori parecen ser una opción adecuada, debido a su capacidad de adaptación a circunstancias variadas y problemas complejos (Rajendra and Brahmajirao, 2020), rasgos que caracterizan dicho proceso de producción. Con un volumen adecuado de datos y capacidad computacional suficiente, estas técnicas se presentan como una alternativa con gran potencial para afrontar este tipo de problemas (Lucia and Karg, 2018).

En base a lo mencionado anteriormente, en este trabajo presenta los resultados alcanzados durante el desarrollo y la aplicación de técnicas de aprendizaje automático basadas en datos en el campo del modelado y control de diversos aspectos del proceso de producción de microalgas, abordando los problemas de modelado dinámico, caracterización de cultivos y control de pH. Los resultados obtenidos han sido respaldados con el uso de sistemas reales, tanto para la adquisición de datos, como para la validación de resultados, todo esto con el objetivo de justificar el potencial de estas técnicas en procesos altamente complejos.

Este documento está organizado de este modo: en la Sección 2 se aborda el problema de modelado dinámico de diversas variables de interés del proceso de producción. En la Sección 3 se trata el problema de caracterización de cultivos, mostrando los resultados obtenidos. La sección 4 plantea el problema de control de pH en fotobiorreactores *raceway*. Finalmente, la sección 5 reúne las conclusiones alcanzadas durante el desarrollo de este trabajo, así como posibles temas de investigación futuros en esta misma línea.

2. Modelo dinámico basado en redes neuronales

La productividad del proceso de cultivo de microalgas viene definida por su capacidad de producción de biomasa. Esta está altamente influenciada por las condiciones a las que se encuentra el cultivo. En función de la especie que se esté cultivando, estas condiciones tendrán un valor óptimo cercano al cual se maximizará la producción. En el caso de los reactores *raceway*, algunas de estas condiciones se deben considerar durante la etapa de diseño del reactor o selección de la cepa, pues están impuestas por la localización geográfica y no son controlables, tales como la radiación que llega al cultivo o la temperatura a la que se encuentra. Otras, como la disponibilidad de nutrientes, se asegurarán de un modo u otro en función del medio que se esté empleando. Finalmente, hay condiciones cuyo control es más factible, y que de igual modo son muy influyentes en la productividad, como el pH y el oxígeno disuelto.

El control de pH es uno de los principales retos durante el proceso de operación de un fotobiorreactor. Cuando esta variable se encuentra cercano a un valor óptimo dependiente de la especie cultivada, la productividad del proceso se incrementa considerablemente. La forma más habitual de controlar el pH es mediante la inyección de CO_2 , ya que esta provoca una disminución progresiva de dicha variable, a la vez que sirve como aporte de carbono para el cultivo (Pawlowski et al., 2014).

Sin embargo, la dinámica del pH es altamente compleja de modelar. Por un lado, es extremadamente no lineal y dependiente de una gran variedad de factores, como la radiación, la temperatura o la concentración del cultivo. Por otro lado, muestra dinámicas muy distintas durante la inyección de CO_2 o la ausencia de esta. Esto motiva la necesidad de modelos precisos que describan la evolución de dicha variable. Tradicionalmente, estos modelos estaban basados en primeros principios, como se mencionó anteriormente, pero a menudo requieren recalibración y puede que no se ajusten a todas las situaciones contemplables.

Ante este problema, se desarrolló un modelo de red neuronal para predecir variables de interés en un fotobiorreactor *raceway* a lo largo del tiempo. Este modelo presenta como entradas distintas variables ambientales, mostradas en la Tabla 1, muestreadas cada minuto a lo largo de un día, así como el valor del pH en el instante anterior. De este modo, el modelo usa cada muestra de entradas para predecir el valor del pH en el siguiente minuto, pudiendo realimentar dicho valor para alcanzar una predicción multipaso. Puesto que la mayor parte de las variables empleadas son predecibles o controlables, el modelo es capaz de predecir el perfil completo de pH en un punto determinado del reactor a lo largo de un día. El modelo resulta de gran utilidad para aplicaciones como sensor virtual, control predictivo basado en modelo o incluso simulador.

El modelo fue entrenado haciendo uso de datos históricos de un fotobiorreactor *raceway* localizado en el Centro de Investigación "Las Palmerillas" (Almería, España), correspondientes a distintos meses del año 2016. Se emplearon un total de 78 días, divididos para el entrenamiento y la validación del modelo. Los datos fueron normalizados previamente al entrenamiento. El modelo entrenado fue una red neuronal de tipo LSTM con el fin de captar el comportamiento dinámico del sistema, empleando la estructura mostrada en la Figura 1. El entrenamiento del modelo tuvo una duración de 2000 épocas, con un tamaño de *batch* de 20 días y un ratio de aprendizaje inicial de 0.01. El modelo

Variable
pH
Oxígeno Disuelto
Radiación Solar
Temperatura ambiente
Temperatura del medio
Nivel del medio
Caudal de CO_2
Caudal de aire
Caudal de medio

Tabla 1: Variables empleadas para la predicción de pH.

fue desarrollado enteramente en *MATLAB*. Tras su aprendizaje, el modelo fue puesto a prueba tanto para predicción a un paso (empleando el valor de pH real para predecir el siguiente), como multipaso (empleando el valor de pH predicho con el mismo fin). Los resultados obtenidos para 4 días del conjunto de validación son los mostrados en la Figura 2. Además de la validación gráfica, se midió el error cuadrático medio (RMSE), calculado según la Expresión 1, para cada día del conjunto de validación. La Tabla 2 presenta los valores medios de RMSE, para predicción a un paso o multipaso. Como se puede apreciar, el modelo logra captar con gran precisión las dinámicas del sistema, especialmente durante las horas de operación del proceso. Este trabajo se encuentra en (Otálora et al., 2020).

$$RMSE = \sqrt{\mu((Y_{real} - Y_{pred})^2)} \quad (1)$$

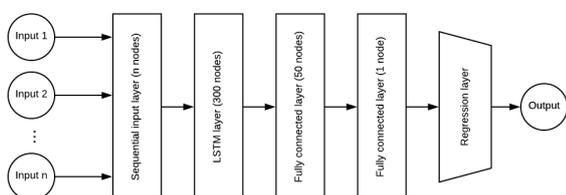


Figura 1: Estructura de red neuronal empleada para el modelo de predicción de pH.

	Predicción a un paso	Predicción multipaso
RMSE	0.1082	0.3720

Tabla 2: Error cuadrático medio del modelo de predicción de pH.

3. Caracterización de cultivos de microalgas

Otro factor fundamental en la producción de microalgas es la composición del cultivo. En función de las especies que conforman el cultivo, sus condiciones óptimas serán unas u otras. Del mismo modo, en función de la aplicación que se le desee dar a la biomasa producida, será recomendable el cultivo de una especie determinada. Por estas razones, conocer la composición del cultivo se vuelve algo fundamental durante el proceso de producción.

Como se mencionó en la Introducción, la forma tradicional de afrontar este problema es a menudo tediosa, y requiere de alta cualificación por parte del personal. Aprovechando la precisión que muestran los algoritmos de aprendizaje automático en tareas de clasificación, se desarrolló una metodología basada en modelos de red neuronal para determinar la composición en especies de cultivos de microalgas.

Los modelos desarrollados son capaces de distinguir la especie de cada célula de microalga entre dos distintas: *Chlorella Vulgaris* y *Scenedesmus Almeriensis*. El procedimiento completo consiste en analizar una muestra del cultivo mediante el dispositivo *FlowCAM* (Fluid Imaging Technologies Inc., 2011), el cual es capaz de proporcionar imágenes individuales y rasgos descriptivos de cada una de las células detectadas en la muestra. A partir de estos datos, los modelos se encargan de clasificar cada elemento individual y, mediante la aplicación de umbrales de clasificación, determinar la composición del cultivo. Estos umbrales se encargan de que el modelo únicamente considere un cuerpo como una determinada especie cuando su grado de similitud sea superior a dicho umbral. Dicho umbral fue fijado en un valor superior a 0.99 para la clasificación de *Chlorella Vulgaris* y 0.5 para *Scenedesmus Almeriensis*.

Se desarrollaron dos modelos: uno emplea como entrada las imágenes individuales de las células, y otro los rasgos descriptivos extraídos por *FlowCAM*. Ambos fueron desarrollados con datos de aproximadamente 150000 células de cada especie, de los cuales se destinaron un 70% a entrenamiento, y el resto para validación o prueba. Para el modelo que usaba rasgos como entrada se optó por una estructura de clasificación simple, con una capa oculta de 25 nodos; mientras que el para el modelo basado en imágenes se empleó una red convolucional profunda empleando la estructura de la red ya existente *AlexNET*. Para este último modelo también fue necesaria una etapa de segmentación y tratamiento de imágenes, ya que las imágenes proporcionadas por *FlowCAM* son collages en formato *.tif* de cada célula individual, como el mostrado en la Figura 3.

Ambos modelos demostraron gran precisión en la clasificación de células individuales, así como en la caracterización de cultivos, siendo validados con muestras puras y mezclas. En la Figura 4 se presentan los resultados de clasificación de muestras mixtas para cada modelo. Estos mismos resultados se muestran en la Tabla 3. Este trabajo se encuentra en (Otálora et al., 2021).

A partir de estos modelos, se desarrolló una interfaz gráfica, mostrada en la Figura 5 con el fin de proporcionar una herramienta intuitiva y de fácil aplicación para caracterización de cultivos. Esta permite el uso de cualquiera de los dos tipos de datos obtenidos mediante *FlowCAM*, de modo que el usuario solo tiene que seleccionar el tipo de dato que va a emplear y la localización de los datos, y la herramienta se encarga de tratar los datos según corresponda y realizar el proceso completo de caracterización, presentando resultados de forma gráfica y numérica. La interfaz y los modelos fueron desarrollados en su totalidad en *MATLAB*. Este trabajo se encuentra en (Otálora Berenguel et al., 2021).

4. Control de pH con Extremum Seeking Control

La complejidad del proceso a la hora de ser modelado también resulta una dificultad a la hora de implementar estrategias

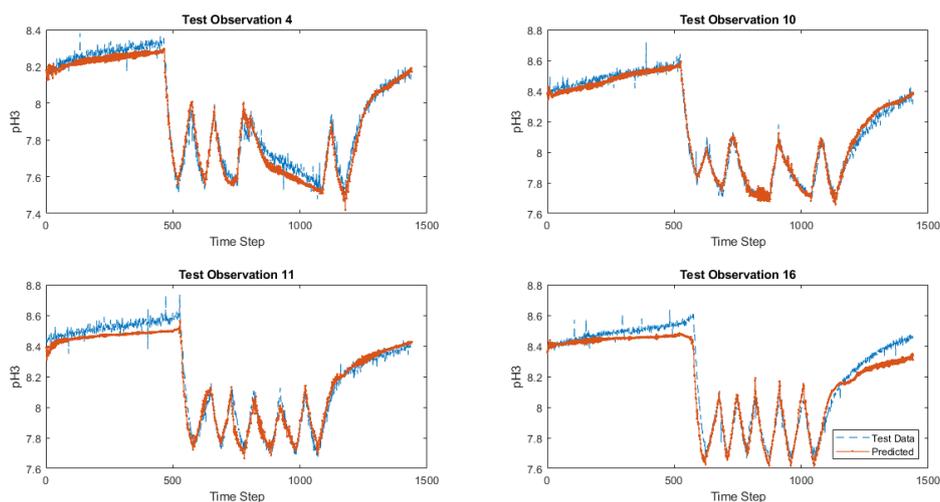
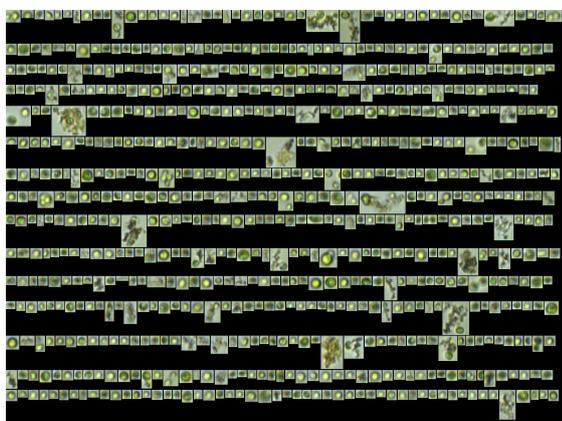


Figura 2: Resultados de predicción de pH multipaso.

Concentración Real (%Ch - %Sc)	Modelo basado en rasgos	Modelo basado en imágenes
1 - 99	5.0 - 95.0	1.2 - 98.8
10 - 90	12.3 - 87.7	10.9 - 89.1
50 - 50	56.5 - 43.5	56.4 - 43.6
90 - 10	86.8 - 13.2	89.7 - 10.3
90 - 90	93.5 - 6.5	97.5 - 2.5

Tabla 3: Concentración real y predicha de cada especie por cada uno de los modelos.

Figura 3: Imagen proporcionada por FlowCAM de muestra de *Chlorella Vulgaris*.

de control convencionales o basadas en modelo. La continua necesidad de recalibración de este tipo de estrategias motiva el desarrollo de metodologías de control libres de modelo y basadas en datos. La disponibilidad de datos de distintas variables del proceso en tiempo real hacen posible la implementación de técnicas de este tipo, como el Extremum Seeking Control (ESC) (Straus et al., 2019).

El ESC es una técnica de control basada en la optimización del gradiente de la función de coste del sistema. Suponiendo un sistema con una función de coste medible, la cual es dependiente

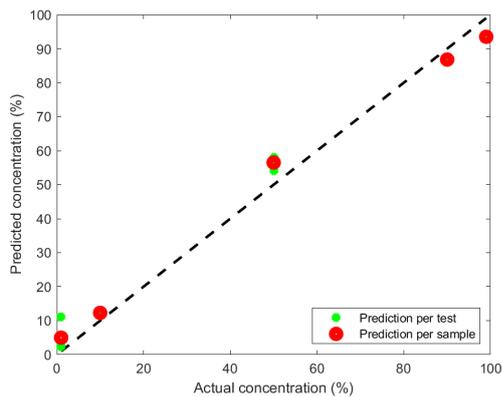
de la señal de control y las perturbaciones, el algoritmo estima una relación lineal entre dicha función y estas señales, con el fin de aplicar un control integral basado en esta relación que logre minimizar la función de coste. Este proceso se refleja en la Figura 6 (Gil et al., 2022).

Aplicado al control de pH, la función de coste seleccionada es el error cuadrático entre el pH y su referencia, cuyo valor es fijo según la especie producida. La señal de control es el caudal de CO_2 y no se considerará ninguna perturbación. Sin embargo, para lograr que el algoritmo sea capaz de converger en sus estimaciones, y evitar problemas con señales de control o funciones de coste constantes, es necesario aplicar un caudal de excitación, que haga reaccionar al sistema en todo momento. Puesto que la dinámica del pH es relativamente lenta y esta técnica es apropiada para sistemas en estado estacionario (situación que nunca se alcanza en reactores *raceway*), es preciso que el periodo de muestreo del sistema sea largo, con el fin de permitir una evolución suficiente del pH.

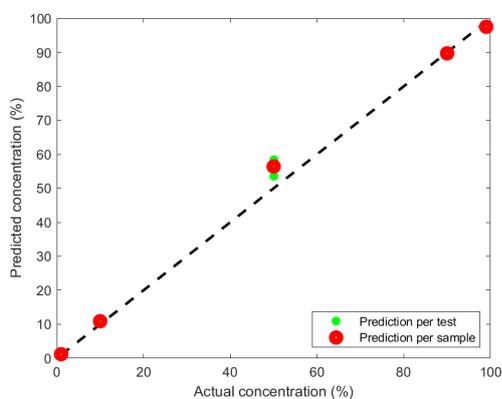
Esta técnica ha sido implementada como parte de una metodología completa para control de pH, incorporando la sintonización de sus hiperparámetros, con el fin de lograr una metodología lo más general posible y sencilla de implementar. Se trata de un trabajo aún en desarrollo, aunque se están obteniendo resultados en simulación, y se está planificando una campaña de ensayos en fotobiorreactores reales.

5. Conclusiones y trabajos futuros

Este trabajo presenta los resultados alcanzados en el desarrollo e implementación de técnicas de aprendizaje computacional



(a)



(b)

Figura 4: Resultados de caracterización de cultivos con (a) Modelo basado en rasgos, (b) Modelo basado en imágenes.

para el modelado y control del proceso de producción de microalgas, abordando los problemas de modelado dinámico, caracterización de cultivos y control de pH. Los resultados alcanzados en todos los problemas justifican el uso de este tipo de técnicas en sistemas de elevada complejidad, demostrando la precisión y el potencial de los algoritmos de aprendizaje computacional.

En el campo de modelado dinámico, el modelo de red neuronal consigue reflejar con precisión el carácter dinámico del sistema, adaptándose a sus no linealidades. Demuestra excelente desempeño en días con condiciones ambientales muy distintas, tanto en predicción a un paso como multipaso. Si bien el proceso de modelado requiere un gran volumen de datos y un esfuerzo significativo durante la fase de filtrado y tratamiento de datos, los resultados obtenidos son precisos, de rápida ejecución y fáciles de adaptar a nuevos datos.

Ante el problema de caracterización de cepas, los modelos de clasificación también han logrado buenos resultados, siendo extremadamente precisos en la clasificación de células individuales y muestras completas, puras o mezcladas. La interfaz desarrollada colabora en la solución a este problema, proporcionando accesibilidad a los modelos obtenidos.

En cuanto al control de pH, la posibilidad de ejecutar un control óptimo sin necesidad de modelo resulta prometedora, dada

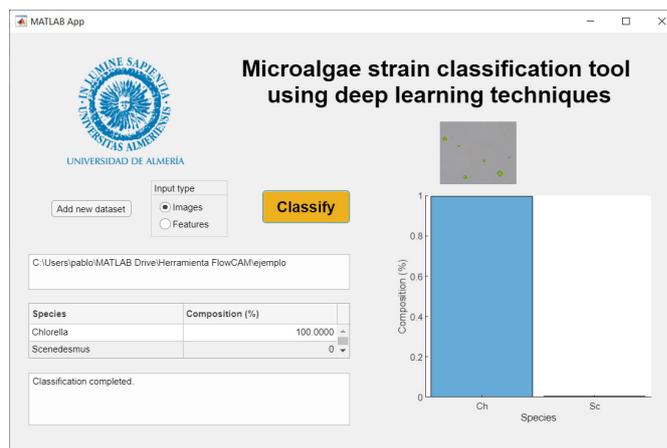


Figura 5: Interfaz gráfica de herramienta para caracterización de cultivos.

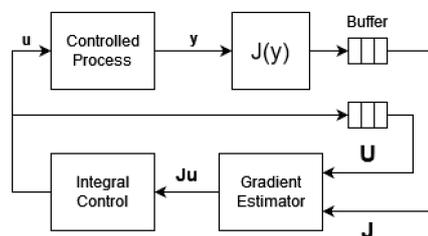


Figura 6: Esquema fundamental de Extremum Seeking Control.

la complejidad del sistema estudiado. La técnica de *Extremum Seeking Control* se muestra como una buena alternativa para este problema, pudiendo ser aplicada también en escalones más altos de la pirámide de control del proceso, como en la optimización de referencias para maximizar la productividad del proceso.

Los trabajos futuros en estas líneas pretenden complementar las herramientas ya desarrolladas. Resulta muy interesante incorporar otras variables al modelo dinámico del reactor *raceway*, tales como el oxígeno disuelto, que también es muy influyente en la productividad, o la concentración de biomasa, cuya predicción puede tener un gran impacto en futuras estrategias de control. Los modelos de caracterización de cultivos pueden ser ampliados a una mayor variedad de especies, llegando a conformar una herramienta mucho más completa. Por otro lado, otras estrategias como el MPC basado en los modelos dinámicos de red neuronal desarrollados, o el aprendizaje reforzado dirigido al control de pH, se presentan a priori como excelentes soluciones para el problema de control del proceso.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado con el Proyecto del Plan Nacional PID2020-112709RB-C21 del Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades.

Referencias

- Abdel-Raouf, N., Al-Homaidan, A.A., Ibraheem, I.B., 2012. Microalgae and wastewater treatment. *Saudi Journal of Biological Sciences* 19, 257–275. doi:10.1016/j.sjbs.2012.04.005.
- Acien, F.G., Fernández Sevilla, J.M., Molina Grima, E., 2017. Microalgae: The basis of mankind sustainability, in: *Case Study of Innovative Projects - Successful Real Cases*. chapter 7, pp. 123–140. doi:10.5772/67930.
- Barceló-Villalobos, M., Serrano, C.G., Zurano, A.S., García, L.A., Maldonado, S.E., Peña, J., Fernández, F.G., 2019. Variations of culture parameters in a pilot-scale thin-layer reactor and their influence on the performance of *Scenedesmus almeriensis* culture. *Bioresource Technology Reports* 6, 190–197. URL: <https://doi.org/10.1016/j.biteb.2019.03.007>, doi:10.1016/j.biteb.2019.03.007.
- Chiaromonti, D., Prussi, M., Casini, D., Tredici, M.R., Rodolfi, L., Bassi, N., Zittelli, G.C., Bondioli, P., 2013. Review of energy balance in raceway ponds for microalgae cultivation: Re-thinking a traditional system is possible. *APPLIED ENERGY* 102, 101–111. doi:10.1016/j.apenergy.2012.07.040.
- Correa, I., Drews, P., Botelho, S., De Souza, M.S., Tavano, V.M., 2017. Deep learning for microalgae classification, in: *Proceedings - 16th IEEE International Conference on Machine Learning and Applications, ICMLA 2017*, Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc.. pp. 20–25. doi:10.1109/ICMLA.2017.0-183.
- Fernández, I., Acien, F.G., Berenguel, M., Guzmán, J.L., 2014a. First principles model of a tubular photobioreactor for microalgal production. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 53, 11121–11136. doi:10.1021/ie501438r.
- Fernández, I., Acien, F.G., Berenguel, M., Guzmán, J.L., Andrade, G.A., Pagano, D.J., 2014b. A lumped parameter chemical-physical model for tubular photobioreactors. *Chemical Engineering Science* 112, 116–129. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2014.03.020>, doi:10.1016/j.ces.2014.03.020.
- Fluid Imaging Technologies Inc., 2011. *FlowCAM® Manual*. URL: www.fluidimaging.com.
- Franco, B.M., Navas, L.M., Gómez, C., Sepúlveda, C., Acien, F.G., 2019. Monoalgal and mixed algal cultures discrimination by using an artificial neural network. *Algal Research* 38, 1–7. URL: <https://doi.org/10.1016/j.algal.2019.101419>, doi:10.1016/j.algal.2019.101419.
- García-Mañas, F., Guzmán, J.L., Berenguel, M., Acien, F.G., 2019. Biomass estimation of an industrial raceway photobioreactor using an extended Kalman filter and a dynamic model for microalgal production. *Algal Research* 37, 103–114. URL: <https://doi.org/10.1016/j.algal.2018.11.009>, doi:10.1016/j.algal.2018.11.009.
- Gil, J.D., Roca, L., Zaragoza, G., Pérez, M., Berenguel, M., 2022. Improving the performance of solar membrane distillation processes for treating high salinity feeds: A process control approach for cleaner production. *Journal of Cleaner Production* 338, 130446. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0959652622000919>, doi:10.1016/j.jclepro.2022.130446.
- González-López, C.V., García-Cuadra, F., Jawiarczyk, N., Fernández-Sevilla, J.M., Acien-Fernández, F.G., 2020. Valorization of microalgae and energy resources, in: *Llamas, B., Romero, M.F.O., Sillero, E. (Eds.), Sustainable Mobility*. IntechOpen, Rijeka. chapter 4. URL: <https://doi.org/10.5772/intechopen.90072>, doi:10.5772/intechopen.90072.
- Guzmán, J.L., Acien Fernández, F.G., Berenguel, M., 2020. Modelling and control of microalgae production in industrial photobioreactors (in Spanish). *Revista Iberoamericana de Automática e Informática Industrial* 00, 1–15. doi:10.4995/riai.2017.8738.
- Heimann, K., Huerlimann, R., 2015. Microalgal classification: Major classes and genera of commercial microalgal species. *Handbook of Marine Microalgae: Biotechnology Advances*, 25–41doi:10.1016/B978-0-12-800776-1.00003-0.
- Jordan, M.I., Mitchell, T.M., 2015. Machine learning: Trends, perspectives, and prospects. *Science* 349, 255–260. doi:10.1126/science.aaa8415.
- Lucia, S., Karg, B., 2018. A deep learning-based approach to robust nonlinear model predictive control. *IFAC-PapersOnLine* 51, 511–516. URL: <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2018.11.038>, doi:10.1016/j.ifacol.2018.11.038.
- Núñez, F., Langarica, S., Díaz, P., Torres, M., Salas, J.C., 2020. Neural Network-Based Model Predictive Control of a Paste Thickener over an Industrial Internet Platform. *IEEE Transactions on Industrial Informatics* 16, 2859–2867. doi:10.1109/TII.2019.2953275.
- Otálora, P., Guzmán, J.L., Acien, F.G., Berenguel, M., Reul, A., 2021. Microalgae classification based on machine learning techniques. *Algal Research* 55, 102256. URL: <https://doi.org/10.1016/j.algal.2021.102256>, doi:10.1016/j.algal.2021.102256.
- Otálora, P., Guzmán, J.L., Berenguel, M., Acien, F.G., 2020. Dynamic model for the pH in a raceway reactor using deep learning techniques, in: *14th APCA International Conference on Automatic Control and Soft Computing*, Bragança, Portugal. doi:10.1007/978-3-030-58653-9_18.
- Otálora Berenguel, P., Guzmán, J.L., Acien Fernández, F.G., Berenguel, M., 2021. Herramienta gráfica para la caracterización de cultivos de microalgas basada en redes neuronales artificiales, in: *XLII JORNADAS DE AUTOMÁTICA: LIBRO DE ACTAS*. doi:10.17979/spudc.9788497498043.119.
- Pawlowski, A., Fernández, I., Guzmán, J.L., Berenguel, M., Acien, F.G., Dormido, S., 2016. Event-based selective control strategy for raceway reactor: A simulation study. *IFAC-PapersOnLine* 49, 478–483. doi:10.1016/j.ifacol.2016.07.388.
- Pawlowski, A., Guzmán, J.L., Berenguel, M., Acien, F.G., 2019. Control system for pH in raceway photobioreactors based on wiener models. *IFAC-PapersOnLine* 52, 928–933. doi:10.1016/j.ifacol.2019.06.181.
- Pawlowski, A., Mendoza, J.L., Guzman, J.L., Berenguel, M., Acien, F.G., Dormido, S., 2014. Effective utilization of flue gases in raceway reactor with event-based pH control for microalgae culture. *BIORESOURCE TECHNOLOGY* 170, 1–9. doi:10.1016/j.biortech.2014.07.088.
- Pittman, J.K., Dean, A.P., Osundeko, O., 2011. The potential of sustainable algal biofuel production using wastewater resources. *Bioresource Technology* 102, 17–25. doi:10.1016/j.biortech.2010.06.035.
- Rajendra, P., Brahmajirao, V., 2020. Modeling of dynamical systems through deep learning. *Biophysical Reviews* 12, 1311–1320. URL: <https://link.springer.com/article/10.1007/s12551-020-00776-4>, doi:10.1007/S12551-020-00776-4/FIGURES/6.
- del Rio-Chanona, E.A., Wagner, J.L., Ali, H., Fiorelli, F., Zhang, D., Hellgardt, K., 2019. Deep learning-based surrogate modeling and optimization for microalgal biofuel production and photobioreactor design. *AIChE Journal* 65, 915–923. doi:10.1002/aic.16473.
- Rodríguez-Miranda, E., Beschi, M., Guzmán, J.L., Berenguel, M., Visioli, A., 2019. Daytime/nighttime event-based pi control for the PH of a microalgal raceway reactor. *Processes* 7, 1–16. doi:10.3390/pr7050247.
- Schmidhuber, J., 2015. Deep learning in neural networks: An overview. *Neural Networks* 61, 85–117. doi:10.1016/j.neunet.2014.09.003, arXiv:1404.7828.
- Singh, S.P., Singh, P., 2015. Effect of temperature and light on the growth of algae species: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 50, 431–444. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2015.05.024>, doi:10.1016/j.rser.2015.05.024.
- Sompech, K., Chisti, Y., Srinophakun, T., 2012. Design of raceway ponds for producing microalgae. *BIOFUELS-UK* 3, 387–397. doi:10.4155/BFS.12.39.
- Straus, J., Krishnamoorthy, D., Skogestad, S., 2019. On combining self-optimizing control and extremum-seeking control – Applied to an ammonia reactor case study. *Journal of Process Control* 78, 78–87. doi:10.1016/j.jprocont.2019.01.012.
- Supriyanto, Noguchi, R., Ahamed, T., Rani, D.S., Sakurai, K., Nasution, M.A., Wibawa, D.S., Demura, M., Watanabe, M.M., 2019. Artificial neural networks model for estimating growth of polyculture microalgae in an open raceway pond. *Biosystems Engineering* 177, 122–129. doi:10.1016/j.biosystemseng.2018.10.002.

Resumen

The use of brackish and seawater for drinking, agricultural and industrial purposes has driven desalination processes for the past 40 years. Between the available technologies, reverse osmosis (RO) is the most predominant due to its low specific energy consumption and high reliability in comparison with thermal processes. The aim of this study is to propose artificial neural network (ANN) based models that allow estimating the water quality parameters. One of the main challenges of RO technology is to produce a high quality permeate in terms of concentration during the operating time. Although permeate samples are taken to be analyzed periodically, it is necessary to have a model that estimates the quality of the permeate in real time to avoid exceeding the concentration limits according with the regulation. Water Analysis and operating data of a full-scale BWRO desalination plant have been used for this purpose. The estimated parameters in the permeate were pH, Alkalinity, sodium, potassium, chlorine, nitrates and boron.

1. Introduction

Water scarcity and water stress have placed desalination of seawater and brackish water as one of the main sources to produce water suitable for human consumption, agricultural purposes, industrial applications, etc Qasim et al. (2019). Among the available technologies, reverse osmosis (RO) is the most extended technology due to its low specific energy consumption (SEC) in comparison with thermal technologies such as multi stage flash (MSF) and multi effect distillation (MED) Nassrullah et al. (2020). The two main disadvantages of RO technology are the fouling propensity of RO membranes and the rejection of some ions that can become toxic to humans or to some crops such as boron, fluorine, heavy metals, etc. Regarding the first disadvantage, notable efforts are being made so that the feed water reaches the RO system with the least possible fouling potential by means of pre-treatments Anis et al. (2019b). In addition, notable efforts are also being made to improve the antifouling properties of RO membranes Goh et al. (2019). As one of the main purposes of RO desalination is to supply drinking water, permeate quality is key. Regarding ion rejection by RO membranes, the scientific community is testing new materials that allow higher rejection of solutes Anis et al. (2019a). The quality criteria of drinking water and the analytical method to assess water quality depends on the regulation of each country. These regulations are dynamic since they are updated as new pollutants are discovered, etc. Recently, the European Union published the directive 2020/2184 related to the quality of water intended for human consumption.

The frequency of water analysis depends on the volume of water distributed or produced each day in a supply area. For large desalination plants it is a minimum of $12 + 1$ for every $25,000 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$ and a fraction of the total volume. In a RO desalination plant, the permeate quality depends among other things on the operating parameters so it can vary quite a bit over the course of a week or even a day. Controlling the ion rejection in real time operation is challenging as the rejection rates depends on the operating parameters of

the desalination plant, fouling effect on RO membranes and physical-chemical parameters of the water source which can also vary Ruiz-García et al. (2020). Having instruments that measure ion concentration in real time is very expensive as it would require an electrode for each ion. The usual and only instrument that provide information in real time about the permeate quality in RO systems is conductimeter. In fact, the permeate conductivity is usually considered as output when control system is designed for desalination plants. It seems appropriate to have a tool that allows estimating water quality based on the parameters that are usually measured in real time and the water analyzes that are being carried out. This would allow estimating the water quality in the periods when water analysis is not available. Artificial neural networks (ANNs) have shown to be an interesting technique that can be applied to desalination processes Jawad et al. (2021); El-Hawary (1993). ANNs have been applied to model desalination processes Abbas and Al-Bastaki (2005) and to predict performances Al Aani et al. (2019); Soleimani et al. (2013). ANNs have also been applied to design estimators in different fields such as electricity Wang and Ramsay (1998); Rubaai et al. (2001), robotics, optics Zhao et al. (2019), control of bioreactors Arpornwichanop and Shomchoam (2009), etc.

The aim of this work was to design an estimator with an ANN based model that allow to know the permeate quality of RO systems from the usual variables measured in real time and that can affect the rejection of solutes such as feedwater conductivity ($Cond_f$), permeate conductivity ($Cond_p$), flux recovery (R) and pH in the feed (pH_f). Other important parameter is the feedwater temperature but, it could not be taken into account since it was not measured.

2. Materials and Methods

2.1. Desalination plant description

The RO desalination plant is located in the Canary Islands, Spain and has been in operation many years. It should be mentioned that this desalination plant has already been

* Autor para la correspondencia: alejandro.ruiz@ulpgc.es

studied previously by the authors conducting modeling and performance studies Ruiz-García and Ruiz-Saavedra (2015); Ruiz-García and Nuez (2016). The raw water was taken from a groundwater well with a depth of 40 meters. The raw water was pumped with a submersible pump into a tank, from where it was pumped into a microfiltration (cartridge filters) and antiscalant dosing system. A high pressure pump takes the feedwater into a RO system, with two stages. The configuration of the RO system was 3:2 pressure vessels (PVs) with 6 BWRO membrane elements per PV. The BW membrane element installed was the BW30-400 Filmtec™, whose characteristics are available in Abbas (2005).

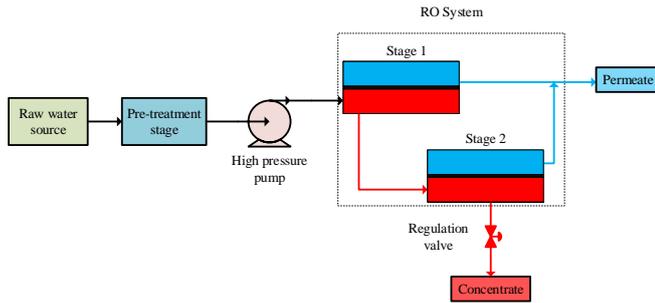


Figura 1: Flow diagram of BWRO desalination plants.

2.2. Experimental data

The instrumentation available in the full-scale desalination plant is the usual, pressure (feed, inter-stage and concentrate lines) and flows (permeate and concentrate lines) indicators. $Cond_f$ and $Cond_p$ were taken monthly with a portable conductimeter. R was calculated from the flow indicators. The purposes of this desalination plant is to produce permeate water for agricultural purposes so the authorities only require feed, permeate and concentrate waters analysis every six months. In September 2005 a membrane replacement was carried out so water analysis from January 2016 to December 2020 were available and considered in this study. The water analysis included the conductivities, pH and different parameters. It should be mentioned that in the analysis of the permeate water there were parameters at such low concentrations that the regulated measurement procedure could not be evaluated with enough accuracy. In these cases, concentrations were shown as $< \text{mg l}^{-1}$. These parameters were not included considering only those with proper measurement such as pH, Alkalinity, Na^+ , K^+ , Cl^- , NO_3^- and B.

2.3. ANNs based model

Two scenarios were evaluated, first one (Fig. 2) having $Cond_f$, $Cond_p$ and R (three neurons) as inputs and the second one adding to the above the pH_f (four neurons). Each model had one target, pH in the permeate (pH_p), Alkalinity, Na^+ , K^+ , Cl^- , NO_3^- and B. So 14 ANN based models were proposed. The architecture of the selected ANN was multilayer perceptron, which has a multilayer feedforward structure Jain et al. (1996). Two hidden layers of neurons were selected as there is

theoretically no reason to use more than one hidden layer the most appropriate for most problems Masters (1993); Hornik et al. (1989). Regarding RO process, most of the works have considered one or two hidden layers Abbas and Al-Bastaki (2005); Lee et al. (2009); Barello et al. (2014). More specific criteria to choose the number of hidden layers would require further testing Principe et al. (2000). The activation function (or transfer function) for the neurons in the hidden layers was tan-sigmoid, while purelin was used in the output layer. The performance function (Eq. (1)) to evaluate the proposed ANN models was the mean square error (MSE) (Eq. (2)). The mean absolute error (MAE) (Eq. (3)) and the mean absolute percentage error (MAPE) were also calculated.

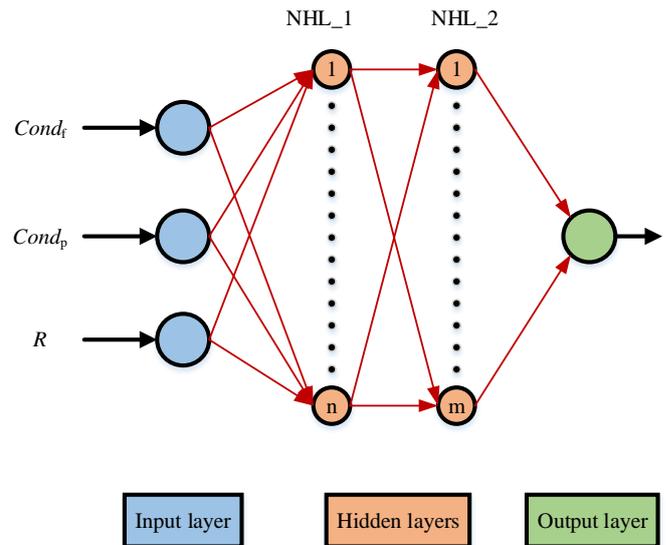


Figura 2: Diagram of the ANN based model for the first scenario.

$$MSE = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k (y_{i,exp} - y_{i,est})^2 \quad (1)$$

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^k |y_{i,exp} - y_{i,est}|}{k} \quad (2)$$

$$MAPE = \frac{100}{k} \sum_{i=1}^k \left| \frac{y_{i,exp} - y_{i,est}}{y_{i,est}} \right| \quad (3)$$

where k is the number of values, $y_{i,exp}$ are the observed values and $y_{i,est}$ the estimated values. A genetic algorithm was used to obtain the minimum number of neurons in each hidden layer that minimize the MSE. The mentioned algorithm is implemented in Matlab's Global Optimization Toolbox through the "ga" function (Deep et al. (2009)). The initial population (was defined at 50) was generated randomly with a uniform distribution. 2 hidden layers of neurons were selected after checking that better results were obtained with 2 instead of 1 hidden layer. The number of neurons in both hidden layers were in a range of 1 and 150. The training block was composed by the 80% of water analysis while a 10% for validation and testing. The training algorithm Levenberg-Marquardt backpropagation was selected after checking that it gave the best results.

3. Results and Discussions

Table 1 shows the architecture and performance values in terms of *MSE*, *MAE* and *MAPE* of each ANN based model for both scenarios. The worst estimation for both scenarios were obtained for nitrates, an ion that is usually poorly rejected by RO membranes. In general, the results obtained in the second scenario was better than in the first. There was not a large difference between both scenarios because the pH_f was quite constant but, it should be mentioned that pH can have a tremendous influence on ion rejection by RO membranes. For example, boron is usually present in seawater as boric acid (H_3BO_3), a weak acid whose dissociation depends on the negative logarithm of acid dissociation constant (*pKa*). The rejection of species by RO membranes depends mainly on their charge. The ionic state of boron is strongly dependent on pH, so its rejection also depends on the pH_f . Regarding the estimation of boron concentration in the permeate, the largest variations were 0.13 mg L^{-1} . The sum of *MSE* values were 3.047 and 1.428 for the scenarios 1 and 2 respectively. This are acceptable results considering that the concentrations were measured in mg L^{-1} and there were ions with notable concentration range such as Cl^- ($21\text{-}43 \text{ mg L}^{-1}$), NO_3^- ($11\text{-}35 \text{ mg L}^{-1}$) and Na^+ ($24\text{-}46 \text{ mg L}^{-1}$).

4. Conclusions

ANN based models for estimating ion concentration in the permeate of RO systems were proposed. Results showed that these parameters can be estimated with an average *MSE* of 0.435 and 0.204 considering 2 scenarios respectively. First considering instrumentation that allow the measure *Cond_f*, *Cond_p* and *R* in real time, and the second one adding pH_f . It should be considered that the number of water samples analyzed were reduced (11) as the purpose of the desalination plant was to produce water for irrigation so the authorities required only water samples each six months. More water samples in wider operating ranges would help to propose models with more accuracy.

Agradecimientos

This research was co-funded by the ERDF and the ACLIE-MAC Project (MAC2/3.5b/380) of the INTERREG V-A MAC 2014-2020 program.

Referencias

- Abbas, A., 2005. Simulation and analysis of an industrial water desalination plant. *Chem. Eng. Process.* 44, 999–1004. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0255270105000097>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.cep.2004.12.001>.
- Abbas, A., Al-Bastaki, N., 2005. Modeling of an ro water desalination unit using neural networks. *Chem. Eng. J.* 114, 139–143. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S138589470500313X>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.cej.2005.07.016>.
- Al Aani, S., Bonny, T., Hasan, S.W., Hilal, N., 2019. Can machine language and artificial intelligence revolutionize process automation for water treatment and desalination? *Desalination* 458, 84–96. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011916419300463>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.desal.2019.02.005>.
- Anis, S.F., Hashaikeh, R., Hilal, N., 2019a. Functional materials in desalination: A review. *Desalination* 468, 114077. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011916419311385>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.desal.2019.114077>.
- Anis, S.F., Hashaikeh, R., Hilal, N., 2019b. Reverse osmosis pretreatment technologies and future trends: A comprehensive review. *Desalination* 452, 159–195. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011916418320411>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.desal.2018.11.006>.
- Arpornwichanop, A., Shomchoam, N., 2009. Control of fed-batch bioreactors by a hybrid on-line optimal control strategy and neural network estimator. *Neurocomputing* 72, 2297–2302. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925231209000484>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.neucom.2009.01.002>. *lattice Computing and Natural Computing (JCIS 2007) / Neural Networks in Intelligent Systems Designn (ISDA 2007)*.
- Barello, M., Manca, D., Patel, R., Mujtaba, I., 2014. Neural network based correlation for estimating water permeability constant in ro desalination process under fouling. *Desalination* 345, 101–111. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011916414002318>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.desal.2014.04.016>.
- Deep, K., Singh, K.P., Kansal, M., Mohan, C., 2009. A real coded genetic algorithm for solving integer and mixed integer optimization problems. *APPL MATH COMPUT* 212, 505–518. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0096300309001830>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.amc.2009.02.044>.
- El-Hawary, M., 1993. Artificial neural networks and possible applications to desalination. *Desalination* 92, 125–147. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0011916493800782>, doi:[https://doi.org/10.1016/0011-9164\(93\)80078-2](https://doi.org/10.1016/0011-9164(93)80078-2). *proceedings of DESAL '92 Arabian Gulf Regional Water Desalination Symposium*.
- Goh, P., Zuhairun, A., Ismail, A., Hilal, N., 2019. Contemporary antibiofouling modifications of reverse osmosis desalination membrane: A review. *Desalination* 468, 114072. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011916419307908>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.desal.2019.114072>.
- Hornik, K., Stinchcombe, M., White, H., 1989. Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks* 2, 359–366. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0893608089900208>, doi:[https://doi.org/10.1016/0893-6080\(89\)90020-8](https://doi.org/10.1016/0893-6080(89)90020-8).
- Jain, A., Mao, J., Mohiuddin, K., 1996. Artificial neural networks: a tutorial. *Computer* 29, 31–44. doi:[10.1109/2.485891](https://doi.org/10.1109/2.485891).
- Jawad, J., Hawari, A.H., Javaid Zaidi, S., 2021. Artificial neural network modeling of wastewater treatment and desalination using membrane processes: A review. *Chem. Eng. J.* 419, 129540. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S138589472101127X>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.129540>.
- Lee, Y.G., Lee, Y.S., Jeon, J.J., Lee, S., Yang, D.R., Kim, I.S., Kim, J.H., 2009. Artificial neural network model for optimizing operation of a seawater reverse osmosis desalination plant. *Desalination* 247, 180–189. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011916409004986>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.desal.2008.12.023>.
- Masters, T., 1993. *Practical neural network recipes in C++*. Morgan Kaufmann.

Tabla 1: Structure of the ANN based models and errors

Scenario	Parameter	NHL_1	NHL_2	MSE	MAE	MAPE (%)
1	pH _p	22	10	0.001	0.013	0.199
	Alkalinity	89	4	0.031	0.001	0.019
	Na ⁺	37	9	0.316	0.008	0.007
	K ⁺	48	2	0.000	0.000	0.042
	Cl ⁻	124	7	0.359	0.041	0.066
	NO ₃ ⁻	96	59	2.332	0.316	3.804
	B	77	14	0.008	0.007	0.276
2	pH _p	24	31	0.001	0.000	0.009
	Alkalinity	44	38	0.034	0.005	0.013
	Na ⁺	65	11	0.220	0.091	0.217
	K ⁺	45	2	0.000	0.001	0.123
	Cl ⁻	23	7	0.129	0.031	0.255
	NO ₃ ⁻	78	78	1.036	0.181	1.602
	B	50	7	0.007	0.007	0.200

- Nassrullah, H., Anis, S.F., Hashaikh, R., Hilal, N., 2020. Energy for desalination: A state-of-the-art review. *Desalination* 491, 114569. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011916420310304>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.desal.2020.114569>.
- Principe, J.C., Euliano, N.R., Lefebvre, W.C., 2000. *Neural and adaptive systems: fundamentals through simulations*. volume 672. Wiley New York.
- Qasim, M., Badrelzaman, M., Darwish, N.N., Darwish, N.A., Hilal, N., 2019. Reverse osmosis desalination: A state-of-the-art review. *Desalination* 459, 59 – 104. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011916418325037>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.desal.2019.02.008>.
- Rubaai, A., Kotaru, R., Kankam, M., 2001. Online training of parallel neural network estimators for control of induction motors. *IEEE Transactions on Industry Applications* 37, 1512–1521. doi:10.1109/28.952529.
- Ruiz-García, A., Nuez, I., 2016. Long-term performance decline in a brackish water reverse osmosis desalination plant. predictive model for the water permeability coefficient. *Desalination* 397, 101–107. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011916416307093>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.desal.2016.06.027>.
- Ruiz-García, A., Nuez, I., Carrascosa-Chisvert, M., Santana, J., 2020. Simulations of BWRO systems under different feedwater characteristics. analysis of operation windows and optimal operating points. *Desalination* 491, 114582. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011916420307207>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.desal.2020.114582>.
- Ruiz-García, A., Ruiz-Saavedra, E., 2015. 80,000h operational experience and performance analysis of a brackish water reverse osmosis desalination plant. assessment of membrane replacement cost. *Desalination* 375, 81–88. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011916415300308>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.desal.2015.07.022>.
- Soleimani, R., Shoushtari, N.A., Mirza, B., Salahi, A., 2013. Experimental investigation, modeling and optimization of membrane separation using artificial neural network and multi-objective optimization using genetic algorithm. *Chem. Eng. Res. Des.* 91, 883–903. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0263876212003012>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.cherd.2012.08.004>.
- Wang, A., Ramsay, B., 1998. A neural network based estimator for electricity spot-pricing with particular reference to weekend and public holidays. *Neurocomputing* 23, 47–57. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925231298000794>, doi:[https://doi.org/10.1016/S0925-2312\(98\)00079-4](https://doi.org/10.1016/S0925-2312(98)00079-4).
- Zhao, Y., Zou, P., Shi, M., Chi, N., 2019. Nonlinear predistortion scheme based on Gaussian kernel-aided deep neural networks channel estimator for visible light communication system. *Optical Engineering* 58, 1 – 6. URL: <https://doi.org/10.1117/1.OE.58.11.116108>, doi:10.1117/1.OE.58.11.116108.

Óscar E. Aponte^{a,*}, Pastora Vega^b, Mario Francisco^c

^a Departamento de Informática y Automática, Facultad de Ciencias, Universidad de Salamanca, Plaza de la Merced, s/n, 37008, Salamanca, España

^b Departamento de Informática y Automática, Facultad de Ciencias, Universidad de Salamanca, Plaza de la Merced, s/n, 37008, Salamanca, España

^c Departamento de Informática y Automática, Facultad de Ciencias, Universidad de Salamanca, Plaza de la Merced, s/n, 37008, Salamanca, España

Resumen

La negociación entre agentes describe el comportamiento de sistemas en los que varios agentes toman decisiones utilizando información local persiguiendo objetivos globales, siendo el comportamiento colectivo dependiente de la recopilación de las decisiones locales y del estado del medio. Desde este punto de vista, tiene relación directa con aquellos problemas de control que involucran la interconexión de múltiples tomadores de decisiones que sean capaces de cambiar sus decisiones en línea, de acuerdo con cambios en el entorno o el comportamiento de otros agentes.

Las técnicas adecuadas que se pueden aplicar en este contexto son las metodologías basadas en el Aprendizaje por Refuerzo (RL) que ofrecen muchas ventajas y que han motivado el desarrollo de muchos algoritmos para la toma de decisiones y el control, proporcionando el estudio de todas las propiedades de estabilidad, convergencia y viabilidad que implica un problema de control. Uno de los principales objetivos del trabajo es proponer nuevas técnicas basadas en RL para resolver en los juegos multijugador en tiempo real los problemas que surgen en el control distribuido cooperativo.

En este trabajo se propone una solución novedosa del uso de redes neuronales con Aprendizaje por Refuerzo, como una opción válida en la negociación de agentes de controladores jerárquicos distribuidos. El método propuesto se implementa en la capa superior de una arquitectura de control jerárquico constituido en sus niveles más bajos por un control distribuido basado en modelos locales y procesos de negociación con lógica difusa. La ventaja de la propuesta es que no requiere el uso de modelos en la negociación y facilita la minimización de cualquier índice de comportamiento dinámico y la especificación de restricciones. Concretamente, en este trabajo, se utiliza un algoritmo de gradiente de política determinista profunda (DDPG) del Aprendizaje por Refuerzo para el entrenamiento del proceso de consenso entre los agentes.

El Aprendizaje por Refuerzo se basa en la interacción con el entorno, donde una acción ejercida sobre el entorno provoca un cambio en este, un nuevo estado del entorno. El agente RL envía una acción al entorno y este retroalimenta al agente con un nuevo estado y una recompensa, siendo el objetivo descubrir a través de prueba y error la acción que genera la mayor recompensa acumulada futura. Para esto, el agente debe preferir acciones que en el pasado han sido efectivas para producir mejores recompensas, pero para descubrir a tales acciones debe de explorar todas las posibles, arriesgándose a que estas nuevas generen malas recompensas, es aquí, el porqué de que funcione a base de prueba y error. Siendo el valor de la recompensa la forma en que el agente se informa de cómo ha calificado, de buena o mala, el entorno la acción enviada.

El agente del algoritmo DDPG está formado por un actor y un crítico, siendo el actor el que durante el entrenamiento aplica diversas políticas que son el cómo debe responder el agente en un momento determinado. La experiencia que va siendo recopilada, es utilizada por el crítico para decidir qué política es asignada al agente al dar por concluido el entrenamiento.

El caso de estudio está formado por ocho tanques acoplados basados en el proceso de tanque cuádruple, los 8 tanques se dividen en cuatro subsistemas formados por dos tanques cada uno (Imagen 1), donde la negociación se lleva a cabo entre los agentes de cada subsistema.

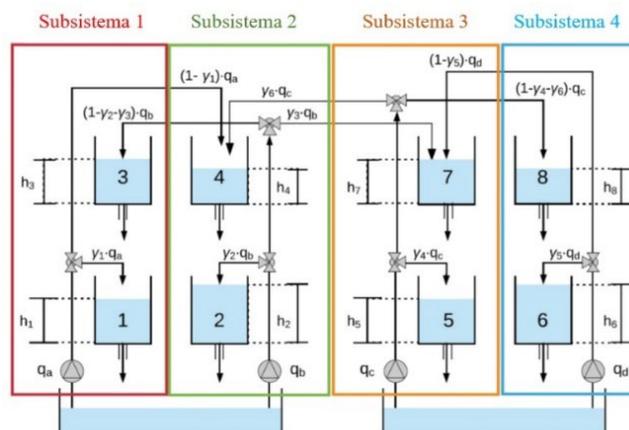


Imagen 1. Sistema de 8 tanques interconectados

El objetivo de la solución planteada es la resolución del problema de negociación entre los agentes para una adecuada regulación y seguimiento de referencias de nivel en los tanques, mediante la acción de 4 bombas, garantizando la estabilidad del esquema de control resultante y que las restricciones sean cumplidas junto con la minimización de la suma de las funciones de costes locales. La arquitectura de control la forman dos capas, la primera emplea DMPC junto con técnicas de lógica difusa, las secuencias resultantes de la primera capa se envían a la capa superior, implementación del agente RL, donde se decide a través de negociación las secuencias de control final (Imagen 2). Como recompensas que le indican al agente qué señales de control considerar como finales, se están utilizando la función de Lyapunov para mejorar la estabilidad, o bien otras basadas en el ISE y esfuerzos de control.



Imagen 2. Arquitectura de control

Resultados:

Los resultados se dividen en problema de regulación y seguimiento de la referencia. Para el problema de regulación, se parte de puntos aleatorios, donde el objetivo del agente es llevar al sistema al punto de operación definido previamente. La respuesta del agente es muy buena, a pesar de un muy pequeños error estacionario en el tanque 6 del subsistema 4, las señales finales resultantes de la negociación del agente RL garantizan la estabilidad del sistema. Frente a saltos en la referencia el agente también garantiza la estabilidad del sistema, de la misma manera que en el problema de regulación presenta un muy pequeño error estacionario en el tanque 6.

Conclusiones:

El trabajo propone una solución novedosa del uso de redes neuronales con aprendizaje por refuerzo y el algoritmo DDPG, como una opción válida en la negociación de sistemas multiagente de controladores jerárquicos distribuidos. La solución propuesta presenta la ventaja de que no requiere el uso de modelos en la negociación y permite la optimización de cualquier índice dinámico asociado al rendimiento del sistema de control y a la estabilidad del sistema resultante.

En este caso el agente RL genera dos señales, secuencias formadas por 5 valores cada una, que son consideradas como señales de control finales. Otra manera de abordar el problema es que el agente RL genera dos valores, considerados alfas, que ponderen entre las señales a negociar otorgando un peso a cada señal sobre la señal final. Otra aproximación al problema es considerar a múltiples agentes DDPG en el que se recopila información de manera local, pero se decide de manera global que política es la adecuada para cada agente DDPG. La implementación del método propuesto no está limitada a la capa superior de la arquitectura de control, también se puede implementar en la capa inferior.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido realizado parcialmente gracias al apoyo de gracias al apoyo de los proyectos PID2019-105434RB-C31 del programa Estatal de proyectos de investigación y del proyecto de la Fundación Samuel Solórzano FS/11-2021.

Referencias

- Masero, E., Francisco, M., Maestre, J. M., Revollar, S., & Vega, P. (2021). Hierarchical distributed model predictive control based on fuzzy negotiation. *Expert Systems with Applications*, 176, 114836.
- Lillicrap, T. P., Hunt, J. J., Pritzel, A., Heess, N., Erez, T., Tassa, Y., ... & Wierstra, D. (2015). Continuous control with deep reinforcement learning. *arXiv preprint arXiv:1509.02971*.
- Sutton, R. S., & Barto, A. G. (2018). *Reinforcement learning: An introduction*. MIT press.



UNIVERSIDAD
DE BURGOS | ubu.es