

Desarrollo de un modelo de caja gris para el caso base de la planta Tennessee Eastman

Laura García González, Ana Isabel González Santos

RESUMEN / ABSTRACT

La planta Tennessee Eastman (TEP) involucra procesos altamente complejos con presencia de no linealidades por lo que es necesario el control de las variables importantes. En este trabajo se desarrolla un modelo del TEP. Para ello se seleccionaron los modelos de caja gris los cuales presentan ventajas con respecto a las clásicas técnicas de modelado que son los modelos de conocimiento y los modelos totalmente empíricos. Primero se obtienen modelos empleando balances de masa y energía, para ello se definen varios parámetros y se realizan algunos supuestos. Luego, a partir de datos del proceso, y con el empleo del MatLab® se obtienen modelos empíricos. La combinación de todos los modelos obtenidos da lugar al modelo de caja gris final y objetivo general del presente trabajo.

Palabras claves: procesos industriales complejos; modelos de caja gris; planta Tennessee Eastman.

Tennessee Eastman plant (TEP) involves very complex process with presence of non linearity, for that it is necessary the control of important variables. In this paper a TEP model is developed. Gray box models are selected to model the process. Gray box models have advantages with respect to classic model techniques, these techniques are knowledge models and empirical models. First, models are obtained employing mass and energy balances, defining parameters and making supposed. Then, from process data and employing MatLab® software, empirical models are obtained. The combination of all models constitutes the gray box final model and the general objective of this paper.

Keywords: complex industrial process; gray box models; Tennessee Eastman plant.

Development of a gray box model for Tennessee Eastman plant base case

1. -INTRODUCCIÓN

Hoy en día, la creciente demanda en cuanto a la calidad de un determinado producto y del funcionamiento de un proceso dado, ha generado un gran interés en la adquisición de conocimiento de los sistemas de ingeniería. En muchos casos, este conocimiento es modelado por un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs) a partir de principios físicos o mecanismos de operación del sistema. El modelado basado en ODEs o modelado de caja blanca tiene la ventaja de representar un amplio rango de sistemas no lineales, pues contiene información útil del proceso.

Los sistemas prácticos, generalmente son complicados y pueden contener fuentes de ruido, no linealidades y dinámica desconocida, que conllevan a la ocurrencia de múltiples errores durante el proceso de modelado. Por tanto, identificar al detalle todas las no linealidades de un sistema práctico para construir un modelo de caja blanca preciso, se hace una tarea sumamente difícil [15].

Los modelos matemáticos han sido un ingrediente principal en la ingeniería de procesos por lo que la comunidad de control ha tomado un interés activo en el desarrollo de técnicas para estimar modelos de sistemas dinámicos a partir de entradas y salidas observadas lo que se conoce como identificación de sistemas. Las técnicas tradicionales han estado relacionadas con métodos estadísticos y en particular con análisis de series de tiempo [10].

Entre los dos extremos de la escala de diseño de la estructura de modelos hay una zona donde el conocimiento físico es combinado con la identificación de los procesos. Estos tipos de modelos son los llamados modelos de caja gris que combinan modelos de conocimiento con modelos obtenidos mediante identificación de sistemas [10].

Hoy en día se hace necesario el diseño de sistemas de control para procesos industriales complejos con el objetivo de mantener las variables en los valores deseados. Para el diseño de estos sistemas es imprescindible contar con modelos adecuados. En el pasado se han desarrollado modelos lineales para muchos procesos industriales que, en su mayoría, presentan un comportamiento no lineal. Sin embargo, para describir procesos altamente no lineales se hace necesario acudir a otros tipos de modelos, entre los que se encuentran los modelos de caja gris.

2.- FUNDAMENTOS DEL MODELADO DE CAJA GRIS

Cuando se trata de obtener un modelo de caja gris de un sistema no lineal es necesario estudiar las estructuras definidas en [8]. Los modelos no lineales pueden contener algo de negro y de blanco en determinadas proporciones, dadas por la estructura seleccionada para el modelo.

Los modelos totalmente blancos o también llamados modelos de conocimiento, son el resultado de un exhaustivo y extenso modelado físico a partir de primeros principios. Este enfoque consiste en considerar todas las relaciones que existen entre las variables relevantes y utilizar un software como soporte para organizar dichas relaciones adecuadamente [8]. Están basados en leyes de conservación físicas y químicas, tales como balance de masa, balance de componente, balance de momento y balance de energía.

Los modelos totalmente negros o también llamados modelos empíricos o modelos experimentales son familias de modelos cuyos parámetros no tienen significado físico, donde el objetivo es encontrar un buen modelo que se ajuste a los datos observados. Para modelos lineales se puede pensar en cajas negras como parametrizaciones de funciones en el dominio de la frecuencia. Para modelos no lineales, las redes neuronales artificiales representan el tipo de estructura de caja negra que ha recibido más interés [10].

Los modelos de caja gris son aquellos que se obtienen mediante la unión o combinación de modelos de conocimiento y modelos totalmente empíricos. La existencia de este tipo de modelos está condicionada por la necesidad de encontrar modelos más adaptables y eficientes, así como por la imposibilidad de describir totalmente la dinámica de un sistema mediante el uso de modelos de conocimiento o totalmente empíricos.

El modelo de caja gris es normalmente más realista que el modelo obtenido mediante identificación pues se dispone de algún conocimiento sobre las leyes que rigen el comportamiento de algunas variables del proceso.

Por otra parte, el modelo de caja gris, aunque es menos interpretable que los modelos de conocimiento, precisa de un menor consumo de tiempo para su construcción que un modelo de conocimiento, para un mismo nivel de complejidad.

Los modelos grises, al conjugar el empirismo y la teoría, logran que los modelos elaborados presenten contenidos teóricos y experimentales más o menos importantes por lo que no solo amplían la exactitud de las predicciones, sino que reducen drásticamente los costos asociados a la fase del modelado [4].

2.1- MODELOS HAMMERSTEIN – WIENER

Los modelos Hammerstein – Wiener son modelos orientados a bloques y clasifican dentro de las estructuras de modelos no lineales totalmente empíricos. Existen dos tipos de bloques básicos para construir estos modelos: sistemas dinámicos lineales (SDL) y transformaciones estáticas no lineales (TENL) [9]. La idea es construir estructuras a partir de bloques simples como se muestra en la figura 1.

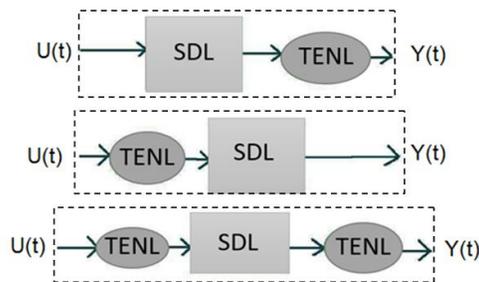


Figura 1

Típicos modelos orientados a bloques:

En la figura 1 arriba se encuentra el modelo Wiener, en el medio, modelo Hammerstein y abajo el modelo Hammerstein – Wiener donde $u(t)$ y $y(t)$ son la entrada y la salida del modelo respectivamente. Estos tres modelos son el resultado de combinar los bloques simples en un número de formas. En la figura 2 se muestra la estructura de los modelos Hammerstein – Wiener, donde $w(t) = f(u(t))$ es una función de transformación no lineal de los datos de entrada, $w(t)$ tiene la misma dimensión de $u(t)$, $x(t) = (B/F) * w(t)$ es una función de transferencia lineal y $x(t)$ tiene la misma dimensión de $y(t)$.

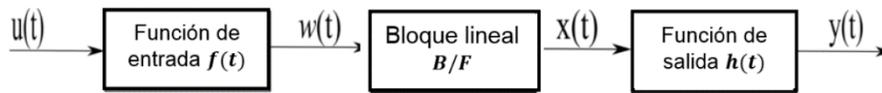


Figura 2

Estructura de los modelos Hammerstein – Wiener.

El modelo Hammerstein-Wiener calcula la salida $y(t)$ en tres pasos:

1. Calcular $w(t)$ de los datos de entradas. $w(t)$ es la entrada de la función de transferencia B/F . La entrada no lineal es una función estática, donde el valor de la salida en un tiempo dado t solo depende del valor de entrada en el tiempo t .
2. Calcular la salida del bloque lineal usando $w(t)$ y las condiciones iniciales, $x(t) = (B/F) w(t)$. El bloque lineal puede ser configurado a través de la especificación del orden del numerador B y el denominador F .
3. Calcular la salida del modelo usando la función no lineal h : $y(t) = h(x(t))$ para transformar la salida del bloque lineal $x(t)$ [17].

La estimación de los parámetros del modelo se hace a través de un proceso iterativo, en donde cada iteración consta de dos pasos: identificar el modelo paramétrico de un sistema lineal y la solución de un problema lineal de mínimos cuadrados para identificar las no linealidades estáticas [1].

Las funciones no lineales de entrada y de salida ($f(t)$ y $h(t)$) fueron implementadas mediante objetos estimadores de no linealidades: zona muerta (deadzone), lineal a trozos (pwnlinear), saturación (saturation) y red sigmoidea (sigmoidnet). En la figura 3 se muestran las gráficas de las primeras tres funciones no lineales mencionadas que emplea MatLab® para estimar modelos Hammerstein – Wiener.

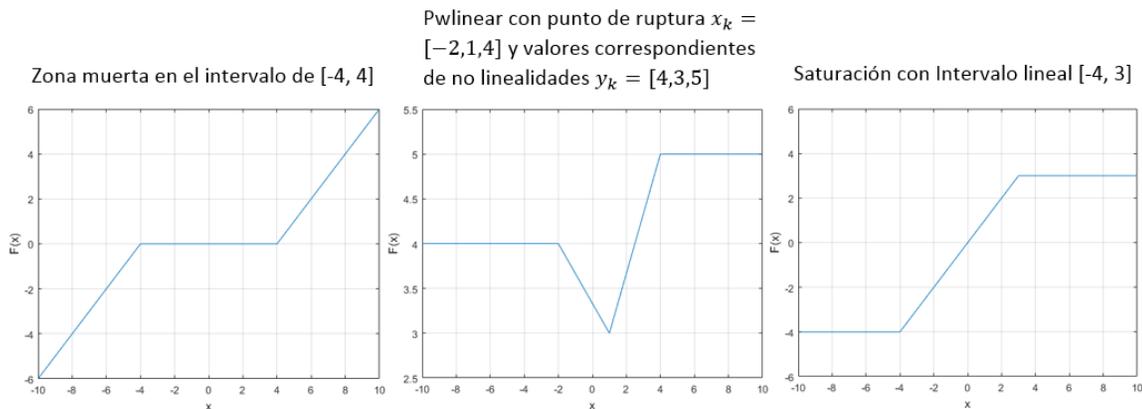


Figura 3

Funciones no lineales que implementa MatLab® para estimar modelos Hammerstein – Wiener.

2.2- METODOLOGÍA PARA LA OBTENCIÓN DEL MODELO DE CAJA GRIS

En la figura 4, se presenta la metodología para obtener el modelo gris, según la propuesta de metodología hecha en [4]. Cada etapa de la metodología presentada es desarrollada para la planta Tennessee Eastman.

La primera etapa de la metodología se tiene como objetivo fundamental lograr un conocimiento más profundo del proceso bajo estudio. Para ello se definen los objetivos del modelo, se lleva a cabo un estudio del proceso de forma tal que se logre conocer las áreas que lo integran y precisar cuál es el área o las áreas de interés y su función en el proceso, se definen posibles herramientas para llevar a cabo el modelado y la identificación, se analizan las variables de mayor importancia, así como su interacción, entre otros elementos.

Esta etapa se puede catalogar de crucial dentro de la obtención del modelo gris y tiene como objetivo dejar establecida la estructura necesaria para llegar a obtener el modelo deseado. Esta estructura se selecciona teniendo en cuenta la información que se tienen del proceso además del conocimiento que se tenga sobre identificación y modelado.

La etapa que le sigue está compuesta por dos fases: formulación de las ecuaciones de balance y el diseño de experimentos y recolección de datos. Ambas fases pueden llevarse a cabo en el orden que se desee.

En la etapa de estimación de parámetros, de acuerdo a la estructura de modelo gris seleccionada, se estiman, mediante algoritmos, los parámetros de la parte del modelo por identificación con el fin de llegar a una representación lo más fiel posible de la realidad dependiendo de los datos de entrada-salida obtenidos experimentalmente.

En la etapa de resolución del modelo gris es posible tomar dos caminos en dependencia de la estructura de modelo seleccionada. Independientemente al camino seleccionado van a existir un conjunto de ecuaciones diferenciales y funciones de variables o parámetros que se integran y resuelven mediante un método de resolución numérico o de iteración polinómica.

La etapa de validación consiste en determinar si el modelo obtenido satisface el grado de exactitud requerido para la aplicación en cuestión. Si se llega a la conclusión de que el modelo no es válido entonces será necesario volver a cualquiera de las etapas anteriores para encontrar posibles errores o realizarle algunos ajustes al modelo o su estructura, para lo que se deben tener en cuenta un gran número de detalles.

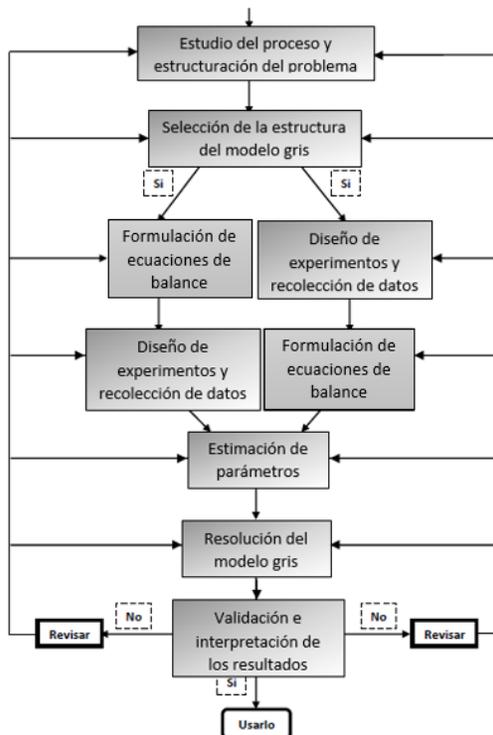


Figura 4

Metodología para la obtención del modelo de caja gris.

3.- ESTUDIO DEL PROCESO: LA PLANTA TENNESSEE EASTMAN (TEP)

En 1993, Downs y Vogel publicaron el modelo de un proceso químico industrial de la Eastman Chemical Company, que quedó conocido como planta Tennessee Eastman (TEP). El propósito de los autores fue crear un problema de referencia para desarrollar y evaluar diferentes tecnologías de control de procesos, principalmente, para estudios relacionados con control de planta completa y control multivariable. El diagrama funcional de la planta puede ser visualizado en la figura 5.

El proceso consiste de cinco unidades de operación: reactor, condensador, separador líquido-vapor, compresor de reciclo y columna de destilación. El reactor es un tanque continuamente agitado (CSTR) de dos fases, en el cual se generan dos productos G y H y un subproducto F a partir de cuatro reactivos A, C, D y E, y un inerte B. La corriente de producto del reactor pasa a través de un condensador para condensar los productos y, de ahí a un separador líquido – vapor. Los componentes no condensados recirculan a través de un compresor centrífugo a la alimentación del reactor, mientras que los productos condensados se llevan a la columna de destilación o “stripper” para separar los reactivos todavía presentes. Los productos G y H abandonan la columna de destilación por su base y se separan en una sección de refinamiento posterior que no se incluye en este problema. El inerte y el subproducto son purgados del sistema en forma de vapor en el separador líquido – vapor [2,7].

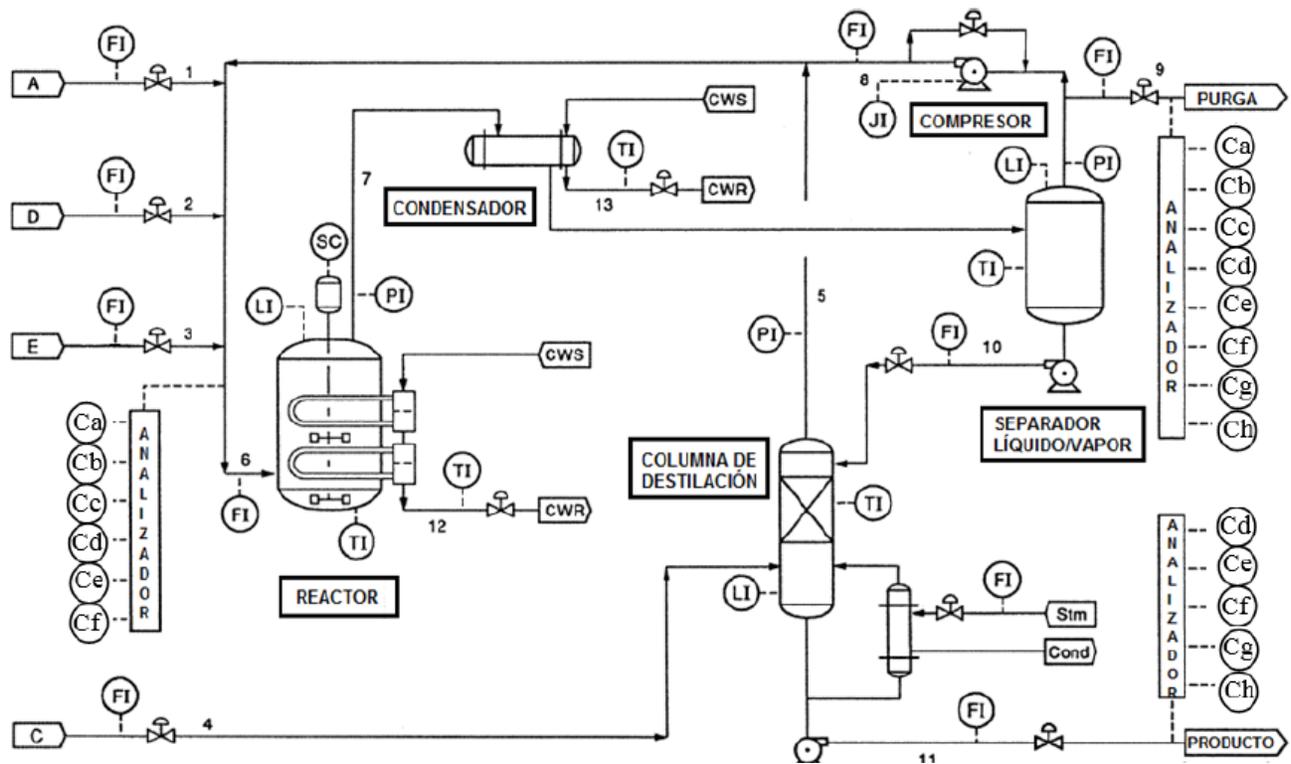


Figura 5

Diagrama funcional de la planta Tennessee Eastman.

En el diagrama de la figura 5 los números representan las corrientes de flujo del proceso. Cada corriente contiene concentraciones de los 8 componentes que intervienen (A, B, C, D, E, F, G y H). En el caso de la corriente 7 de salida del reactor contiene una mayor concentración de los productos G y H que de los reactivos A, B, C y D y del inerte B.

El proceso dispone de 12 válvulas para manipulación y 41 mediciones para realizar monitoreo y control, siendo 22 de ellas continuas y 19 discretas. Downs y Vogel introdujeron dos características adicionales que hacen su modelo más realista: la primera de ellas es que cada medida contiene un ruido gaussiano aleatorio, característico de los instrumentos de medida; la segunda son una serie de controladores que paralizan la planta cuando uno de los límites operacionales es violado (los límites operacionales se encuentran tabulados en [2,7]).

Adicionalmente, los autores proponen diez posibles perturbaciones que pueden afectar al proceso. Se presentaron también seis modos de operación de la planta, definidos como la relación másica entre G y H en la corriente de producto y la velocidad de producción. El caso base es 50/50, los demás están definidos como 10/90, 90/10; y velocidades máximas de producción. En [11] se determinaron las condiciones óptimas de estado estacionario para cada uno de los modos de operación, logrando una disminución de más del 30% en los costos de operación de la planta. En todos los casos se demostró que es óptimo operar con la presión máxima y el nivel mínimo en el reactor, velocidad máxima de agitación en el reactor y la apertura mínima de la válvula de vapor. Además, en la mayoría de los casos, es óptimo utilizar una apertura mínima de la válvula de retorno del compresor. También se resalta que las variables controladas deben seleccionarse cuidadosamente y no de forma arbitraria.

Es necesario resaltar que una de las restricciones más importantes en la planta son los límites de operación de las variables presión y temperatura en el reactor; si la presión alcanza el límite superior de seguridad de 3000kPa, la operación de la planta se detiene, es decir, se apaga. El listado de las variables medidas y manipuladas de la TEP y sus valores operacionales en estado estacionario son aquí omitidos, pero pueden ser encontrados en [2] o en [13].

3.1.- ESTRUCTURACIÓN DEL PROBLEMA

La primera etapa de la metodología incluye, también, la estructuración del problema donde es importante definir las variables de salida del modelo gris, las cuales se dividen en las que son modeladas por primeros principios y las que son modeladas por identificación. Esta selección fue hecha basada en la información que se tiene de cada una, relacionada con los parámetros disponibles, la complejidad del modelado empleando leyes físicas, la cantidad de datos disponibles en el caso de la experimentación, entre otros aspectos.

En la figura 6 se muestra un esquema del modelo de caja gris a obtener. Se realiza una representación de las variables del modelo por subproceso. Los flujos de A hasta B son la alimentación de la planta y se corresponden con las corrientes de la 1 hasta la 4. Las corrientes 1, 2 y 3 alimentan al subsistema reactor, en este subsistema se modelan las variables que se muestran en la figura 6. La corriente 7 de producto del reactor pasa a través del condensador, subsistema que no se incluye en el modelo, y de ahí hacia el separador líquido – vapor donde se modelan las variables representadas en la figura en cuestión. Los componentes no condensados recirculan hacia la alimentación a través del compresor, subsistema que tampoco se modela. Los componentes condensados pasan a la columna de destilación a través de la corriente 10, en este subsistema se modelan las variables que se muestran en la figura. Por último, la corriente 11 de producto de la columna es la corriente de flujo final del proceso bajo estudio. En esta corriente de producto las variables de interés son las concentraciones de los componentes del D al H.

Las variables a modelar por primeros principios se encuentran encerradas en un cuadro blanco y las que se modelan mediante identificación de sistemas, encerradas en un cuadro negro. Los subsistemas condensador y compresor solo se muestran sin describir sus variables internas, pues no son objetivo de la investigación.

En los tres subsistemas, reactor, separador y columna de destilación se modelan, las cantidades de sustancia de los ocho componentes (N_{ji} con $j = r, s$ y cd e $i = A...H$), las temperaturas (T_j) y los niveles líquidos y de vapor (N_{lj} y N_{vj}), a partir de principios físicos con el empleo de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs). En el caso del reactor también se modelan, empleando esta técnica, la temperatura del refrigerante (T_c) y los flujos de alimentación y de producto (F_6 y F_7) correspondientes a las corrientes 6 y 7 en la figura 6 respectivamente.

Son modeladas mediante identificación de sistemas, empleando modelos Hammerstein – Wiener, las presiones de los tres subsistemas (P_r , P_s y P_{cd}) y las concentraciones de los componentes del D – H en la corriente 11 o corriente de producto (C_d , C_e , C_f , C_g , C_h). Estas variables son modeladas mediante identificación de sistemas debido a que las leyes físicas y químicas que intervienen en su dinámica son complejas.

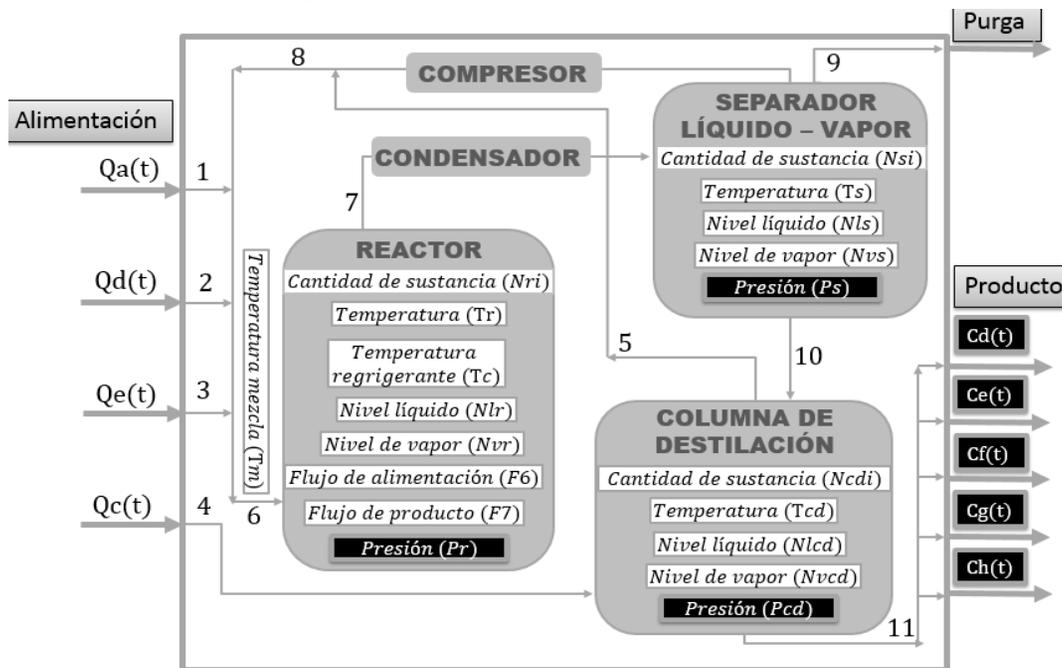


Figura 6

Modelo de caja gris a obtener con las variables implicadas.

4- SELECCIÓN DE LA ESTRUCTURA DEL MODELO GRIS

Existen varios tipos de estructuras para los modelos de caja gris: serie, paralela y serie – paralela. Para el modelo de caja gris a ser obtenido en la presente investigación se seleccionó la estructura paralela según muestra la figura 7. En esta estructura se trata de ajustar o compensar con el efecto o la magnitud de una de las técnicas lo que no se logra representar mediante el uso puro de la otra, de forma tal que la salida del modelo se ajuste lo más exacto posible a los valores reales del proceso.

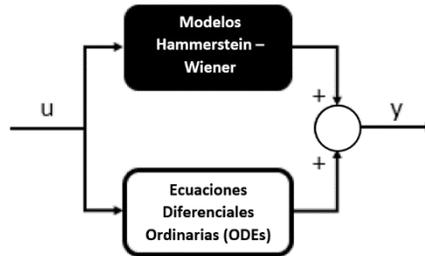


Figura 7

Estructura paralela del modelo de caja gris de la TEP.

Se seleccionó esta estructura para el modelo gris a obtener debido a las características del proceso. Se tienen un conjunto de variables a modelar solamente por principios físicos y otro conjunto que se modela solamente por identificación experimental. La información que se tienen de cada conjunto de variables permite realizar esta selección. Esto permite también ahorro de tiempo en el proceso de modelado.

5- FORMULACIÓN DE LAS ECUACIONES DE BALANCE

Las ecuaciones (1)-(3) representan las cantidades de sustancia para los ocho componentes en el reactor, separador y columna de destilación, respectivamente, donde las variables y parámetros que intervienen se muestran en las tablas 1 y 2. El subíndice $k = 1:4$, representa las cuatro reacciones que se llevan a cabo en el reactor.

$$\frac{dN_{r_i}}{dt} = VN_6 - VN_7 \pm \sum_{k=1}^4 v^* R_k \quad (1)$$

$$\frac{dN_{s_i}}{dt} = VN_7 - VN_8 - VN_9 - VN_{10} \quad (2)$$

$$\frac{dN_{cd_i}}{dt} = VN_4 + VN_{10} - VN_5 - VN_{11} \quad (3)$$

Las ecuaciones (4)-(8) representan las dinámicas de las temperaturas en la zona de mezcla, en el reactor, en la camisa refrigerante, en el separador y en la columna de destilación, respectivamente.

$$\frac{dT_m}{dt} = \frac{E_1 + E_2 + E_3 + E_5 + E_8 - E_6}{V_m * dens_6 * Ce_6} \quad (4)$$

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{E_6 - E_7 - E_T - E_{R1} - E_{R2}}{V_{lr} * dens_{lr} * Ce_7} \quad (5)$$

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{F_c * dens_c * C_{ec} * (T_{ci} - T_c) + E_T}{V_c * dens_c * C_{ec}} \quad (6)$$

$$\frac{dT_s}{dt} = \frac{E_7 - E_8 - E_9 - E_{10} + H_o V_s}{V_{ls} * dens_{ls} * Ce_{10}} \quad (7)$$

$$\frac{dT_{cd}}{dt} = \frac{E_4 + E_{10} - E_5 - E_{11} - H_o V_{cd} + Q_{cd}}{V_{lcd} * dens_{lcd} * Ce_{11}} \quad (8)$$

La ecuación (9) representa las energías asociadas a las diferentes corrientes de la planta. La ecuación (10) representa la transferencia de energía con la camisa refrigerante.

$$E_j = Fm_j * Ce_j * T_j \quad (9)$$

$$E_T = U_{Atc} * (Tr - Tc) \quad (10)$$

Las ecuaciones (11)-(12) representan los volúmenes líquidos y de vapor para los tres subprocesos (reactor, separador y columna de destilación). Como las áreas transversales de los tanques de los tres subprocesos se mantienen constantes durante la operación de la planta, los niveles correspondientes son calculados como el porcentaje que representan los volúmenes líquidos y de vapor con respecto al volumen total del subproceso en cuestión.

$$Vl = \frac{\sum_{i=D}^H N_i (*PM_i)}{dens_i} \quad (11)$$

$$Vv = Vt - Vl \quad (12)$$

Las ecuaciones (13)-(14) representan los flujos máscicos de alimentación y producto del reactor (ver variables y parámetros en las tablas 1 y 2).

$$Fm_6 = coef_6 * \sqrt{(Pcd - Pr)} \quad (13)$$

$$Fm_7 = coef_7 * \sqrt{(Pr - Ps)} \quad (14)$$

En la tabla 1 se definen las variables del modelo gris con el símbolo y la unidad de medida correspondiente, donde $i = A - H$ representa los ocho componentes y $j = 1 - 12$ las corrientes de la planta (ver figura 4). En la tabla 1 se listan las variables del modelo gris.

Tabla 1
Variables del modelo gris.

Variable	Símbolo	Unidad
Cantidad de sustancia en el reactor	Nr_i	$kmol$
Cantidad de sustancia en el separador	Ns_i	$kmol$
Cantidad de sustancia en la columna	Ncd_i	$kmol$
Temperatura en la zona de mezcla	Tm	$^{\circ}C$
Temperatura del reactor	Tr	$^{\circ}C$
Temperatura de la camisa refrigerante	Tc	$^{\circ}C$
Temperatura del separador	Ts	$^{\circ}C$
Temperatura de la columna	Tcd	$^{\circ}C$
Nivel líquido	Nl	%
Nivel de vapor	Nv	%
Flujo de alimentación al reactor	Fm_6	kg/h
Flujo de producto del reactor	Fm_7	kg/h
Presión en el reactor	Pr	kPa
Presión en el separador	Ps	kPa
Presión en la columna de destilación	Pcd	kPa

En la tabla 2 se listan los parámetros que intervienen en las ecuaciones (1)-(14) con el símbolo y unidad de medida correspondiente. Los guiones representan que el parámetro es adimensional. Algunos de estos valores fueron tomados directamente de [2], [8], [15] y [3], otros fueron estimados o calculados mediante ecuaciones básicas de la química.

6-DISEÑO DE EXPERIMENTOS Y RECOLECCIÓN DE DATOS

Los modelos Hammerstein – Wiener a obtener están constituidos por 12 variables de entrada, que son las 12 variables manipuladas de la TEP (ver primera columna de la tabla 3), y una salida, correspondiente a la variable a identificar (ver primera columna de la tabla 4). Por tanto, se obtuvieron ocho modelos con 12 entradas y una salida.

Para el proceso de identificación se realizaron varios experimentos, pero los más efectivos fueron los que se llevaron a cabo para pocas variaciones en las entradas, máximo $\pm 1\%$. Esto está dado porque estas variaciones en las entradas se obtuvo variabilidad en las salidas y por tanto mejores datos para identificar.

Para conformar las señales de entrada, lo primero que se hizo fue aplicar un paso por cada una de ellas de manera independiente, manteniendo las restantes en los valores nominales, con el objetivo de obtener información valiosa del sistema, como son las constantes de tiempo que se pueden ver en la tabla 3. Conocer los valores de las constantes de tiempo permite saber el tiempo aproximado que demora cada variable en responder a un estímulo dado. Las constantes de tiempo solo fueron obtenidas para las variables continuas (las tres presiones). Para las concentraciones, que son variables discretas, se llevó a cabo un análisis a partir de observar las respuestas en los experimentos realizados, y se determinó que los datos obtenidos constituirían buenas representaciones de las dinámicas de las variables, ya que respondían adecuadamente a los estímulos realizados. En la tabla 3 se aprecia que para la entrada ocho no se obtuvieron las constantes de tiempo. Esto está dado porque cuando se estimuló con un paso por esa entrada no se apreció cambio en las presiones.

Tabla 2
Parámetros del modelo gris

Parámetro	Símbolo	Unidad
Variación de cantidad de sustancia	VN_i	$kmol/h$
Coefficiente estequiométrico de las reacciones químicas	v	–
Flujo molar	Fm_{oj}	$kmol/h$
Flujo másico	Fm_j	kg/h
Fracción másica del componente i en la corriente j	FM_{ij}	–
Peso molecular	PM_i	–
Variación de energía	E_j	kJ/h
Variación de energía por transferencia con la camisa	E_T	kJ/h
Volumen total de la zona de mezcla	Vm	m^3
Volumen total	Vt	m^3
Densidad de la mezcla en corriente 6	$dens_6$	kg/m^3
Calor específico del fluido en la corriente j	Ce_j	$kJ/(kg * ^\circ C)$
Temperatura en la corriente j	T_j	$^\circ C$
Densidad del líquido en el reactor	$dens_{lr}$	kg/m^3
Coefficiente global de transferencia de calor multiplicado por el área superficial de contacto	U_{Atc}	$kJ/(h * ^\circ C)$
Temperatura inicial del líquido refrigerante	T_{ci}	$^\circ C$
Volumen de la camisa	V_c	kPa
Densidad del líquido refrigerante	$dens_c$	kg/m^3
Calor específico del líquido refrigerante	Cec	$kJ/(kg * ^\circ C)$
Densidad del líquido en el separador	$dens_{ls}$	kg/m^3
Densidad del líquido en la columna	$dens_{lcd}$	kg/m^3
Energía asociada al calor de vaporización (separador)	$HoVs$	kJ/h
Energía asociada al calor de vaporización (columna de destilación)	$HoVcd$	kJ/h
Energía adicionada a la columna de destilación por el flujo de vapor.	Q_{cd}	kJ/h
Velocidad de la reacción	R_k	$kmol/h$
Coefficientes para el cálculo de los flujo de alimentación y producto del reactor	$coef_{6,7}$	$kg/(h\sqrt{kPa})$

Para la obtención de los datos se fue estimulando el sistema por todas las entradas al mismo tiempo, teniendo en cuenta las constantes de tiempo de cada variable.

Según [2] fue añadido un ruido gaussiano a las mediciones característico de los instrumentos de medida. Por tanto, los datos obtenidos fueron filtrados empleando un filtro promediante de ventana siete para eliminar dicho ruido. Estos filtros se emplean con el objetivo de eliminar el ruido en las mediciones a través de realizar un promedio de tantos datos como tamaño de la ventana, en este caso es siete. Luego se van reemplazando los datos por el promedio de los siete que le siguen. Como resultado de este algoritmo se pierden algunos datos (tamaño de la ventana - 1).

Tabla 3
Constantes de tiempo (en horas) de las variables continuas modeladas por identificación

Entradas	τr	τs	τcd
Válvula de flujo de D (corriente 2)	0.1088	0.1088	0.1088
Válvula de flujo de E (corriente 3)	0.1744	0.1729	0.1744
Válvula de flujo de A (corriente 1)	0.2085	0.2085	0.2117
Válvula de flujo de A y C (corriente 4)	0.0741	0.0710	0.0710
Válvula del reciclo del compresor	0.0279	0.0165	0.0640
Válvula de purga (corriente 9)	0.049	0.0444	0.046
Válvula de flujo de líquido del separador (corriente 10)	0.1384	0.1354	0.1338
Válvula de flujo de líquido del stripper (corriente 11)	-	-	-
Válvula del vapor al stripper	0.1855	0.1837	0.1855
Válvula de refrigerante al reactor	0.0208	0.0818	0.0866
Válvula de refrigerante al condensador	0.0833	0.0818	0.0866
Velocidad del agitador	0.3078	0.3078	0.3078

En la tabla 4 se resume la cantidad de datos empleados para la estimación y validación de cada modelo.

Tabla 4
Datos empleados en la identificación

Modelo	Estimación	Validación
Presión del reactor	269	268
Presión del separador	302	478
Presión de la columna de destilación	283	490
Concentración de D en corriente 11	437	349
Concentración de E en corriente 11	473	313
Concentración de F en corriente 11	461	325
Concentración de G en corriente 11	377	409
Concentración de H en corriente 11	405	381

Se estimaron los ocho modelos empleando el Ident que tiene implementado el software MatLab® [11]. En la tabla 5 se muestran la lista de parámetros de los modelos Hammerstein Wiener a obtener según lo explicado en la sección 2.1.

Tabla 5
Parámetros de los modelos Hammerstein – Wiener

Parámetros del modelo Hammerstein – Wiener	Descripción
nb	Orden del numerador de la función de transferencia.
nf	Orden del denominador de la función de transferencia.
nk	Retardo de la función de transferencia.
B, F	Vectores de dimensión (1x12 cell) que contienen en cada celda los coeficientes de las relaciones entre la salida y las 12 entradas.

Los modelos fueron validados a partir de los porcentos de ajuste que brinda la herramienta *Ident* de MatLab®. También se calcularon el error cuadrático medio (MSE) y el criterio de la varianza (VAF) para los ocho modelos. Los índices calculados se muestran en la tabla 6. Los dos índices calculados para los modelos obtenidos se encontraron en un rango adecuado para considerar válidos los modelos.

Tabla 6
Índices de validación calculados para los modelos experimentales

Modelo	MSE	VAF (%)
Presión del reactor	1.9372	99.9863
Presión del separador	1.3402	99.4183
Presión de la columna	0.5431	99.9385
Concentración de D	$1.62 \cdot 10^{-6}$	97.2061
Concentración de E	$9.36 \cdot 10^{-5}$	95.82
Concentración de F	$4.37 \cdot 10^{-6}$	94.56
Concentración de G	0.0128	97.3658
Concentración de H	0.0415	93.6697

7.- OBTENCIÓN, RESOLUCIÓN Y VALIDACIÓN DEL MODELO GRIS

La obtención y resolución del modelo de caja gris se realizó mediante el empleo del software MatLab® [12]. Las ecuaciones diferenciales ordinarias fueron combinadas con los modelos Hammerstein- Wiener para dar lugar al modelo de caja gris.

Los resultados de la resolución del modelo se muestran en las figuras 8-15. Los modelos obtenidos por identificación de sistemas fueron validados empleando los datos del proceso como se explicó en la sección 6. El resto de los modelos fueron validados a través de una validación conceptual. La validación conceptual de un modelo se define como la determinación de que las teorías y los supuestos fundamentales del modelo conceptual sean correctas y que la representación del modelo del problema, la estructura lógica y matemática del mismo y las relaciones causales sean razonables para el propósito pretendido del modelo. Las teorías y supuestos fundamentales de los modelos pueden ser probadas usando análisis matemático y métodos estadísticos [14].

Llevar a cabo una validación empleando los datos del proceso, para los modelos obtenidos mediante modelado de caja blanca, sería demasiado exigente, ya que la planta cuenta con muchas variables que no fueron modeladas. Esto implica que existen dinámicas que no se incluyeron en el modelo global obtenido y que pueden influir en el comportamiento de las variables de salida.

La figura 8 muestra las cantidades de sustancia de los componentes dentro del reactor. Los reactivos disminuyen a través del tiempo a medida que se llevan a cabo las reacciones químicas. Los productos G y H y del subproducto F aumentan a lo largo del tiempo. También se aprecia la cantidad de sustancia del inerte B que se mantienen sin mucha variación ya que este componente no reacciona con ningún otro.

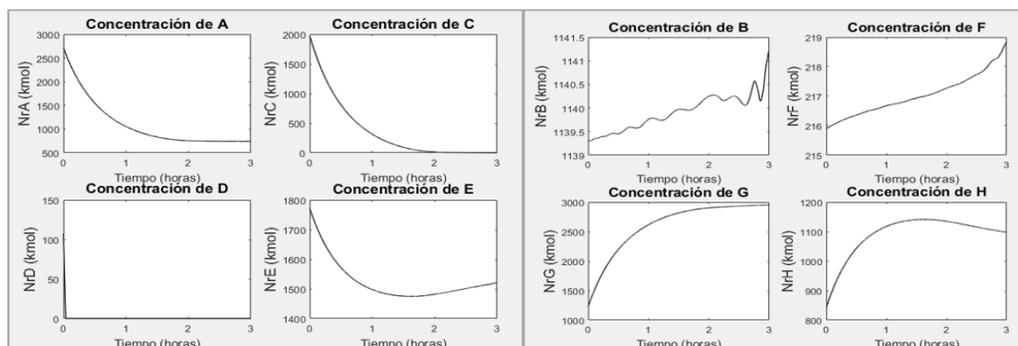


Figura 8

Cantidades de sustancia de los reactivos, el inerte los subproductos y los productos en el reactor.

En la Fig. 9 se muestran las cantidades de sustancia de los componentes en el separador. Estas variables se mantienen con pocas variaciones debido a que en este subproceso no se llevan a cabo reacciones químicas.

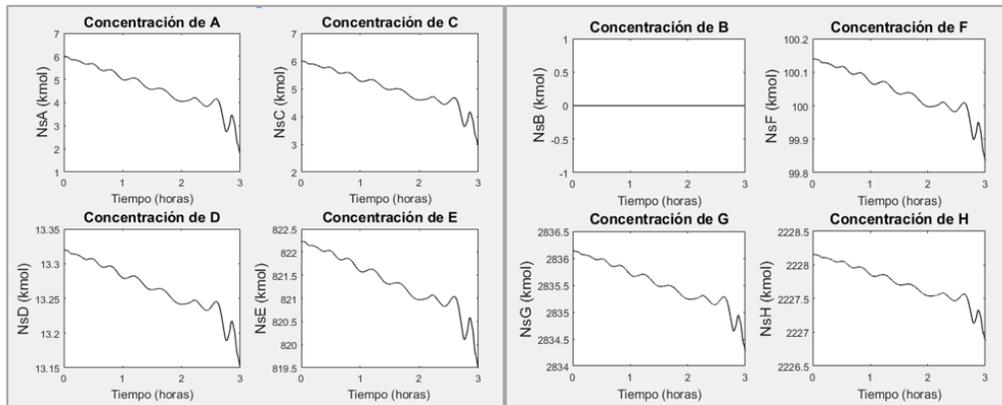


Figura 9

Cantidades de sustancia de los reactivos, el inerte los subproductos y los productos en el separador.

En la figura 10 se observan las cantidades de sustancia de los componentes en la columna de destilación. De manera similar a lo que ocurre en el separador, estas variables varían muy poco debido a que no hay ocurrencia de reacciones químicas. Los componentes A, B y C aumentan sus cantidades de sustancia con respecto al separador debido a la presencia del flujo de corriente 4 de alimentación a la columna, que presenta fracción molar de estos tres primeros componentes.

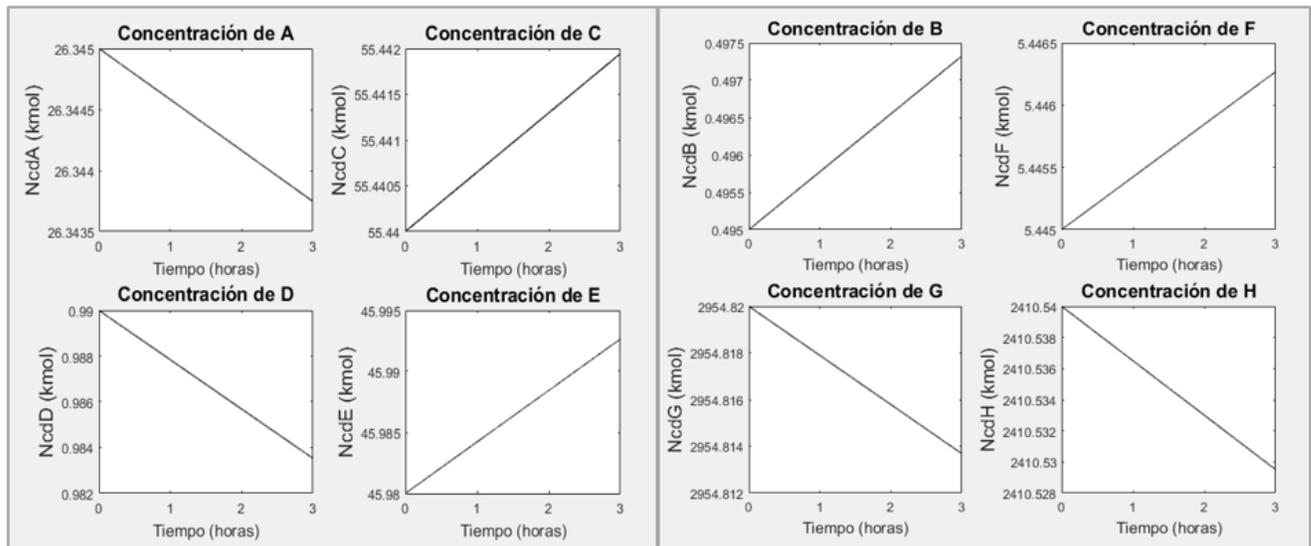


Figura 10

Cantidades de sustancia de los reactivos, el inerte los subproductos y los productos en la columna de destilación.

En la figura 11 se aprecian las temperaturas del proceso. En la zona de mezcla la temperatura no presenta mucha variación hasta aproximadamente pasadas 2.7 horas donde se produce su disminución repentina. Esta disminución está dada porque aproximadamente en ese mismo tiempo el flujo de alimentación al reactor (ver figura 13) comienza a aumentar. La temperatura en la zona de mezcla tiene gran dependencia del flujo de alimentación al reactor. El flujo de alimentación al reactor, a su vez, depende de las presiones en el reactor y en la columna de destilación, variables que, en el tiempo mencionado (2.7 horas), comienzan a aumentar hasta su valor límite máximo.

En este punto de la resolución del modelo se aprecia la interacción entre las variables modeladas por principios físicos y las obtenidas mediante identificación.

La temperatura del reactor aumenta a lo largo del tiempo. Este aumento se debe a que las energías adicionadas son mayores que las cedidas. Además, los calores desprendidos por las reacciones exotérmicas que se llevan a cabo en este subproceso contribuyen al aumento de la temperatura.

La temperatura del refrigerante disminuye a través del tiempo tendiendo al valor de temperatura inicial del líquido refrigerante, que en esta simulación fue de 24°C. La temperatura del separador presentó más variación a lo largo del tiempo, mientras que la de la columna de destilación se mantuvo casi sin cambios. Ambas variables resultaron ser muy sensibles a los cambios en las condiciones iniciales de cantidades de sustancia en los subprocesos.

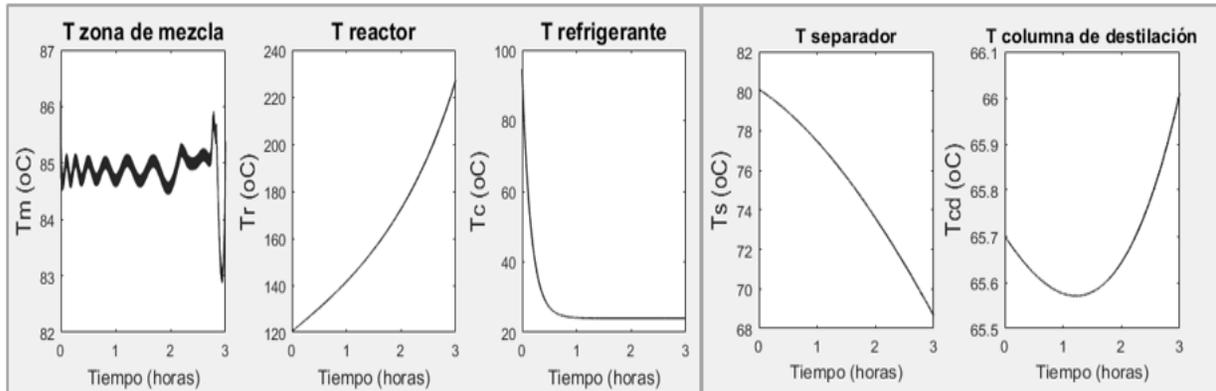


Figura 11

Temperaturas en la zona de mezcla en el reactor, en la camisa refrigerante, en el separador y en la columna de destilación.

En la figura 12 se muestran los niveles de los tres subprocesos: reactor, separador y columna de destilación. Los tres niveles presentaron un comportamiento inverso a la temperatura del subproceso correspondiente. O sea, a medida que aumenta la temperatura, disminuye el nivel o viceversa.

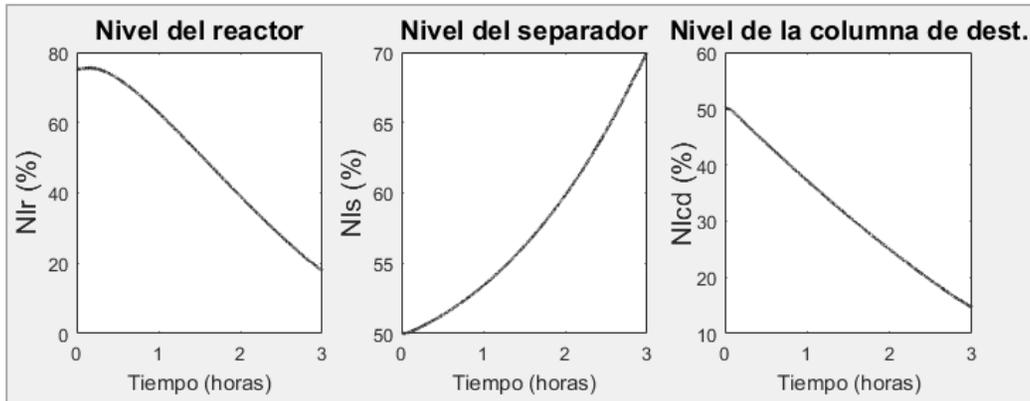


Figura 12

Niveles líquidos en el reactor, separador y en la columna expresados en porcentaje.

En la figura 13 se muestran los flujos de alimentación y producto del reactor, los cuales dependen de las presiones en el reactor, separador y columna de destilación. Estos flujos influyen en la temperatura de la zona de mezcla, y, por tanto, también en la temperatura del reactor.

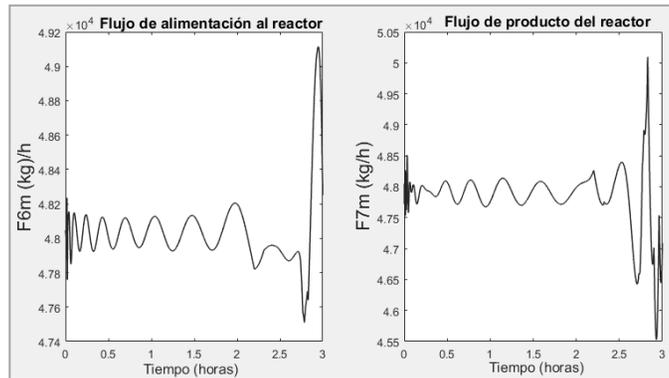


Figura 13

Flujos de alimentación y producto del reactor.

En la figura 14 se observan las presiones de los tres subprocesos. Fueron graficadas las presiones reales (gráfico en azul) y las presiones resultantes de los modelos (gráfico naranja). Los modelos obtenidos mostraron índices de validación en un rango adecuado. Las gráficas, como se aprecia en la figura 14, prácticamente se superponen.

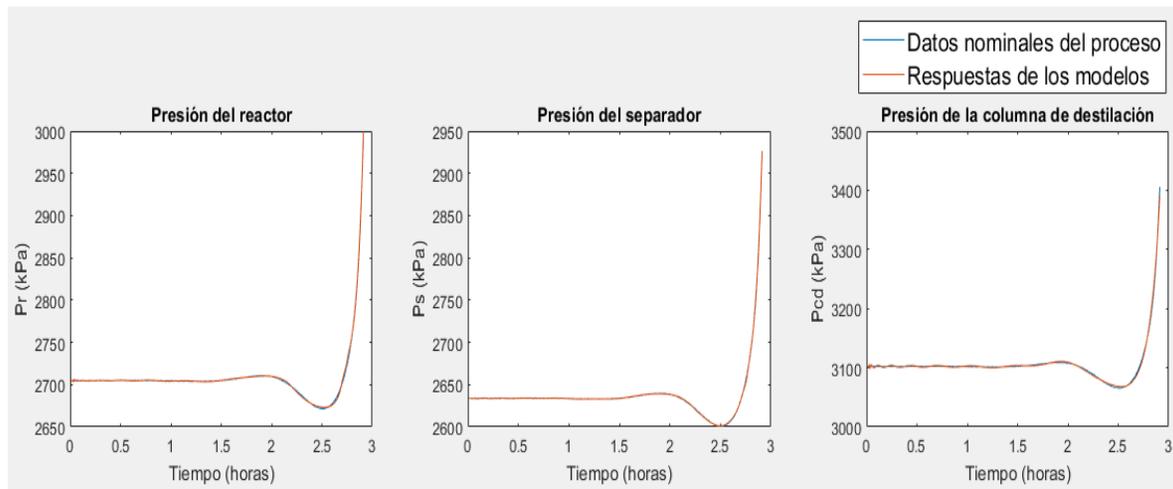


Figura 14

Presiones del reactor, separador y de la columna de destilación.

Estos modelos fueron validados en la etapa de la metodología donde fueron obtenidos. Presentan un comportamiento sin mucha variación hasta pasadas 2.7 horas, aproximadamente donde comienzan a aumentar hasta un nivel límite máximo de presión.

En la figura 15 se muestran las concentraciones de los componentes en la corriente 11 o corriente de producto. Estos modelos también fueron validados anteriormente. Se graficaron los datos nominales del caso base de las concentraciones y las respuestas de los modelos a estos datos nominales. Se aprecia a simple vista que las respuestas de los modelos capturan las tendencias del comportamiento nominal del proceso. Los modelos ofrecen una respuesta más suave que sigue la tendencia de los cambios bruscos de los datos nominales. Esta comparación ratifica la validez de los modelos obtenidos.

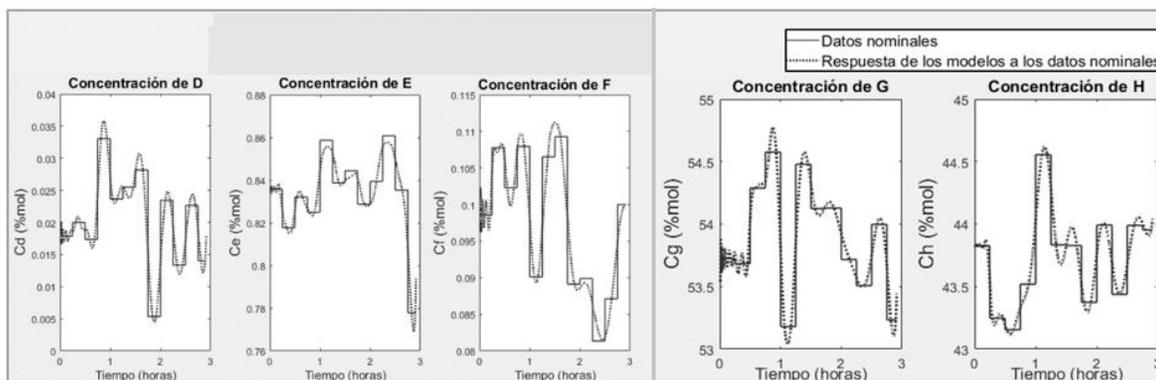


Figura 15

Concentración de los componentes en la corriente de producto.

8.- CONCLUSIONES

En la presente investigación se obtuvo un modelo de caja gris para el caso base de la planta Tennessee Eastman. La planta contiene un gran número de variables con un comportamiento no lineal y complejo por lo que los clásicos modelos de caja blanca y de caja negra no son capaces de describirla con suficiente exactitud debido a las desventajas que presentan estas técnicas de modelado. Por tanto, se acude a los modelos grises para contrarrestar estas desventajas y lograr una representación lo más exacta posible del sistema bajo estudio. La metodología empleada condujo satisfactoriamente a la obtención del modelo. La formulación y obtención de las ecuaciones diferenciales requirió de tiempo y esfuerzo debido a la cantidad de leyes físicas y químicas involucradas, además del elevado número de parámetros. Para el diseño de los experimentos se tuvo en cuenta las constantes de tiempo de las variables a identificar. Los modelos Hammerstein – Wiener empleados brindaron resultados extraordinarios con altos porcentos de ajuste. Por último, se presentaron los resultados del modelo y se realizó una validación conceptual del mismo. Las variables de salida presentaron comportamientos lógicos y se cumplieron los supuestos y teorías fundamentales.

REFERENCIAS

1. Brouri A. Wiener-Hammerstein Models Identification, International journal of mathematical models and methods in applied sciences, 10, pp. 244-250, 2016.
2. Downs J. J. and Vogel E. F. A plant-wide industrial process control problem, Computers and Chemical Engineering, 17(3), pp. 245-255, 1993.
3. Duvall P. M. On line optimization of the Tennessee Eastman challenge problem, Journal of Process Control, tesis de Maestría, Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Texas Tech, 1996.
4. Fernández Rodríguez E. Metodología para la obtención de modelos híbridos para el control, tesis de Maestría, Departamento de Automática y Computación, Instituto Superior Politécnico “José Antonio Echeverría”, La Habana, 2011.
5. Giri F., Brouri A., Ikhouane F., Chaoui F. and Radouane A. Identification of Hammerstein-Wiener Systems Including Backlash Input Nonlinearities. In Proc. 11th IFAC International Workshop on Adaptation and Learning in Control and Signal Processing, University of Caen Basse-Normandie, Caen, France, July 3-5. 2013.
6. Jockenhövel T., Biegler L. T. and Wächter A. Dynamic optimization of the Tennessee Eastman process using the OptControlCentre, Computers and Chemical Engineering, 27(11), pp. 1513-1531, 2003.
7. Ye L., Cao Y., Yuan X. and Song Z. Subset Measurement Selection for Globally Self-Optimizing Control of Tennessee Eastman Process, Preprint, 11th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems, including Biosystems June 6-8, 2016. NTNU, Trondheim, Norway.
8. Ljung L. Approaches to Identification of Nonlinear Systems, Division of Automatic Control, Linköping University, 2011.
9. Ljung L. Perspectives on system identification. Annual Reviews in Control, 34(1), 2010.
10. Ljung L. System identification in a MIC perspective, Modeling, Identification and Control, 15(3), pp. 153-159, 1994.

11. MathWorks, Inc. Herramienta de Identificación de Sistemas de MatLab®, Versión 9.6 (R2017a), 2017.
12. MathWorks, Inc. Programa MatLab®, Versión 9.2.0.538062 (R2017a), 2017.
13. Ricker N. L. Optimal steady state operation of the Tennessee Eastman challenge process, *Computers and Chemical Engineering*, 19(9), pp. 949-959, 1995.
14. Sargent R. G. Validation and verification of simulation models, In Proc. 2004 Winter Simulation Conf., ed. R.G. Ingalls, M. D. Rossetti, J. S. Smith, and B. A. Peters, 2004.
15. Tan K. C. and Li Y. Grey-box model identification via evolutionary computing, *Control Engineering Practice*, 10, pp. 673-684, 2002.
16. Tian Z. and Hoo K. A. Multiple Model-Based Control of the Tennessee-Eastman Process, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44, pp. 3187-3202, 2005.
17. Vijayalaxmi M. and Shanmuga V. Identification of Doubly Fed Induction Generator based Wind Energy Conversion System Using Piecewise-Linear Hammerstein Wiener Model. Published in: 2013 7th International Conference on Intelligent Systems and Control (ISCO) DOI: 10.1109/ISCO.2013.6481119, 2013.

CONFLICTO DE INTERESES

No existe conflicto de intereses entre los autores, ni con ninguna institución a la que cada uno está afiliado, ni con ninguna otra institución.

Las opiniones expresadas aquí son únicamente responsabilidad de los autores y no representan la posición de la Institución o las instituciones a las que están afiliados.

CONTRIBUCIONES DE LOS AUTORES

Laura García González: contribución importante a la revisión bibliográfica, su análisis e interpretación. Obtención del modelo. Redacción del borrador del artículo y de su versión final.

Ana Isabel González Santos: contribución importante a la idea y diseño de la investigación. Dirección metodológica del desarrollo de la obtención del modelo. Contribución en el análisis de la información y bibliografía. Participación en la redacción del borrador del artículo. Revisión crítica de la versión final y su aprobación.

AUTORES

Laura García González, graduada de Ingeniería en Automática con título de oro en la Universidad Tecnológica de La Habana (CUJAE), trabaja en la UEB Citox perteneciente a la empresa Laboratorios AICA, La Habana, Cuba, No. ORCID 0000-0002-3815-158X email: garcia Gonzalezlau95@gmail.com, le interesa el control automático de procesos y en específico las técnicas de control avanzadas.

Ana Isabel González Santos, graduada de Ingeniería en Máquinas Computadoras en 1994, máster en Automática en 1996, doctora en Tecnología de la Información por la Universidad de Valladolid, España 2000, sobresaliente Cum Laude, profesora titular colaboradora del departamento de Automática y Computación de la Universidad Tecnológica de La Habana (CUJAE). Coordinadora de la carrera de Ingeniería en Automática, líder de proyecto de Control Predictivo No Lineal, La Habana, Cuba, No. ORCID 0000-0002-7969-4070, email: anita@automatica.cujae.edu.cu, gonzalezsantosanaaisabel@gmail.com.



Esta revista se publica bajo una [Licencia Creative Commons Atribución-No Comercial-Sin Derivar 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/)