



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

Tesis de Doctorado en Ingeniería Química

**APLICACIÓN DE TÉCNICAS DE OPTIMIZACIÓN
AL DISEÑO Y ANÁLISIS DE SISTEMAS
DINÁMICOS NO LINEALES**

Luis Gerónimo Matallana Pérez

Bahía Blanca

Argentina

2011

PREFACIO

Esta tesis se presenta como parte de los requisitos para optar por el grado académico de Doctor en Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Sur (UNS) y no ha sido presentada previamente para la obtención de un título similar en esta institución u otras.

La misma contiene los resultados obtenidos de la investigación desarrollada en la Planta Piloto de Ingeniería Química (PLAPIQUI), dependiente del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) y de la UNS, durante el periodo comprendido entre abril de 2006 y febrero de 2011.

La investigación fue desarrollada bajo la dirección del Dr. José Alberto Bandoni, profesor del departamento de Ingeniería Química de la UNS e investigador principal del CONICET y la co-dirección del Dr. Aníbal Manuel Blanco, investigador asistente del CONICET.

Luis Gerónimo Matallana Pérez

Planta Piloto de Ingeniería Química (UNS - CONICET)
UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

RESUMEN

El diseño y análisis de sistemas dinámicos es una tarea desafiante debido fundamentalmente a la no linealidad requerida en las ecuaciones matemáticas de los modelos, con el fin de lograr representaciones realistas de los sistemas y procesos. En lo que a ingeniería química respecta, estas no linealidades se manifiestan en los diversos términos de las ecuaciones de balance y se potencian por la realimentación positiva introducida por los ciclos de masa y energía y por las hoy en día rigurosas restricciones de calidad de producto, medio ambiente y seguridad.

En esta tesis, se proponen metodologías para el diseño y análisis de sistemas dinámicos no lineales empleando elementos de la Teoría de Estabilidad de Lyapunov con la aplicación de técnicas de optimización. La base principal de la investigación es la determinación de estimaciones de los dominios de atracción de los puntos de equilibrio asintóticamente estables.

En primer lugar, se desarrolla una metodología para la estimación de dominios de atracción haciendo uso de funciones de Lyapunov de tipo racional y aplicando técnicas de optimización global. Esta metodología consiste en determinar el mejor conjunto de nivel de una función de Lyapunov contenida en la región de definición negativa de su derivada temporal.

Posteriormente, se desarrolla una metodología para el diseño de sistemas dinámicos no lineales con el objetivo de optimizar en forma indirecta la extensión de los dominios de atracción. Este enfoque de diseño, asegura simultáneamente estabilidad asintótica del punto de equilibrio resultante y un dominio de atracción óptimo en términos del criterio adoptado.

Las metodologías propuestas se ilustran por medio de ejemplos y se aplican a procesos y sistemas de interés ingenieril.

ABSTRACT

Dynamic systems design and analysis is a challenging task due to the nonlinearity required by the mathematical modeling equations, in order to obtain a realistic representation of the systems and processes. Regarding the chemical engineering discipline, these complexities are found in the different terms of the balance equations and are boosted by the positive feedback introduced by mass and energy recycles and by the current restrictive constraints on product quality, environment and safety.

In this thesis, different methodologies are proposed for the design and analysis of non-linear dynamical systems based on elements of the Lyapunov stability theory with the application of optimization techniques. The calculation of estimations of the domains of attraction of asymptotic stable equilibrium points is the main basis of this research.

In the first place, a methodology is developed for the estimation of the domains of attraction of asymptotically stable equilibrium points using Lyapunov functions of the rational type and applying global optimization techniques,. This methodology consists in finding the best level set of a Lyapunov function contained in the negative definite region of its temporal derivate.

Secondly, a methodology for the design of non-linear dynamical systems in order to optimize in an indirect way the extension of the domain of attraction is developed. This approach simultaneously ensures asymptotic stability of the resulting equilibrium and an optimum domain of attraction in terms of the adopted criterion.

The proposed methodologies are illustrated through examples and applied to processes and systems of engineering interest.

LISTADO DE PUBLICACIONES

La investigación desarrollada durante la realización de esta tesis dio lugar a la publicación de los siguientes trabajos:

Revistas

- Matallana L. G., Blanco, A. M. and Bandoni, J. A. (2007); Estimation of Domains of Attraction in Epidemiological Models with Constant Removal Rates of Infected Individuals. *Journal of Physics: Conference Series* 90 (1), art. no. 012052.
- Matallana L. G., Blanco, A. M. and Bandoni, J. A. (2010); Estimation of Domains of Attraction: A Global Optimization Approach. *Mathematical and Computer Modelling*, 52 pp. 574-585.
- Matallana L. G., Blanco, A. M. and Bandoni, J. A. (2010); Nonlinear Dynamic Systems Design Based on the Optimization of the Domain of Attraction. *Mathematical and Computer Modelling*. doi:10.1016/j.mcm.2010.10.011
- Matallana L. G., Blanco, A. M. and Bandoni, J. A. (2010); Design of Reactor-Separator-Recycle Systems Based on the Optimization of the Domain of Attraction. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, (En revisión)

Capítulos de libro

- Matallana, L. G., A. M. Blanco, J. A. Bandoni (2008); Eigenvalue Optimization Techniques for Nonlinear Dynamic Analysis and Design. "Optimization in Food Engineering", Ed. Ferruh Erdogdu, Taylor & Francis.

Congresos Nacionales e Internacionales

- Matallana, L. G., A. M. Blanco, J. A. Bandoni (2006); Metabolic Network Design Under Stability Constrains. V Congreso Argentino de Ingeniería Química. Buenos Aires Argentina.
- Matallana, L. G., A. M. Blanco, J. A. Bandoni (2007); Estimation of Domains of Attraction in Epidemiological Models with Constant Removal Rates of Infected Individuals. SABI-07. San Juan, Argentina.
- Matallana, L. G., A. M. Blanco, J. A. Bandoni (2007); On a New Optimization-Based Lyapunov Methodology for the Estimation of Domains of Attraction. AIChE annual meeting. Utah – USA
- Matallana, L. G., A. M. Blanco, J. A. Bandoni (2008); Numerical Calculation of Distillation Boundaries. IV Congreso Internacional de Matemática Aplicada a Ingeniería y Enseñanza de Matemática en Ingeniería, Buenos Aires – Argentina.
- Matallana, L. G., A. M. Blanco, J. A. Bandoni (2009); A Global Optimization Approach for the Estimation of Domains of Attraction. 10th International Symposium on Process Systems Engineering. Salvador Bahia – Brasil.
- Matallana, L. G., A. M. Blanco, J. A. Bandoni (2009); Estimation of Domains of Attraction of Chemical and Biochemical Reactors. The 24th IFIP TC7 conference on system modelling and optimization. IFIP TC 7. Buenos Aires – Argentina.
- Matallana, L. G., A. M. Blanco, J. A. Bandoni (2009); Estimation of Domains of Attraction of Tumor Dormancy Equilibriums. XVII Congreso Argentino de Bioingeniería y VI Jornadas de Ingeniería Clínica. Rosario – Argentina.
- Matallana, L. G., A. M. Blanco, J. A. Bandoni (2010); Estimation of Domains of Attraction of Ideal Reactor Separator Networks with Mass Recycle. The International Conference on Continuous Optimization (ICCOPT). Santiago de Chile – Chile.

TABLA DE CONTENIDOS

	Pág.
PREFACIO	ii
RESUMEN	iii
ABSTRACT	iv
LISTA DE PUBLICACIONES	v
TABLA DE CONTENIDOS	vii
ÍNDICE DE FIGURAS	x
ÍNDICE DE TABLAS	xv
CAPÍTULO 1	
Introducción General	
1.1 Dominio de Atracción	1.2
1.2 Temática y Estructura de la Tesis	1.5
CAPÍTULO 2	
Conceptos Matemáticos Preliminares	
2.1 Introducción	2.1
2.2 Dinámica de Sistemas no Lineales	2.1
2.3 Teoría de Estabilidad de Lyapunov	2.6
2.4 Función de Lyapunov de Tipo Cuadrático	2.9
2.5 Estimación del Dominio de Atracción (DA)	2.10

2.6 Funciones de Lyapunov de Tipo Racional	2.15
2.7 Consideraciones Finales	2.20

CAPÍTULO 3

Introducción al Diseño y Análisis de Sistemas Dinámicos no Lineales

3.1 Introducción	3.1
3.2 Diseño-para-Estabilidad	3.4
3.3 Estimación de Dominios de Atracción (DA)	3.6
3.4 Consideraciones Finales	3.9

CAPÍTULO 4

Estimación de Dominios de Atracción Mediante Optimización Global

4.1 Introducción	4.1
4.2 Estimación del DA como un Problema de Optimización	4.2
4.3 Nueva Formulación para la Estimación del DA	4.5
4.4 Ejemplos de Aplicación de la Nueva Formulación	4.12
4.4.1 Ejemplo 1: Sistema Polinomial de Dos estados	4.13
4.4.2 Ejemplo 2: Sistema No Polinomial de Dos estados	4.14
4.4.3 Ejemplo 3: Sistema Polinomial de Tres estados	4.16
4.4.4 Ejemplo 4: Modelo Epidemiológico	4.17
4.4.5 Ejemplo 5: Modelo de un Reactor de Tanque Agitado Continuo	4.22
4.5 Consideraciones Finales	4.26

CAPÍTULO 5

Diseño de Sistemas Dinámicos no Lineales Basado en la Optimización de los Dominios de Atracción

5.1 Introducción	5.1
------------------	-----

5.2 Consideraciones Preliminares para una Nueva Formulación de Diseño	5.1
5.3 Nueva Formulación de Diseño de Sistema No Lineales	5.9
5.4 Ejemplos de Aplicación de la Nueva Formulación	5.14
5.4.1 Ejemplo 1: Sistema Polinomial de Dos Estados	5.15
5.4.2 Ejemplo 2: Sistema Polinomial de Dos Estados	5.17
5.4.3 Ejemplo 3: Oscilador de Van der Pol	5.18
5.4.4 Ejemplo 4: Sistema No Polinomial de Dos estados	5.21
5.5 Consideraciones Finales	5.22
CAPÍTULO 6	
Casos de Estudio	
6.1 Introducción	6.1
6.2 Antecedentes de los Casos de Estudio	6.1
6.3 Caso I: Sistema de Fermentación	6.3
6.4 Caso II: Sistema Reactor – Separador – Reciclo	6.6
6.4.1 Diseño del Proceso	6.9
6.4.2 Resultados	6.12
6.5 Consideraciones Finales	6.17
CAPÍTULO 7	
Conclusiones y Trabajos Futuros	
7.1 Conclusiones sobre la Contribución	7.1
7.2 Trabajos Futuros	7.3
REFERENCIAS	R.1

ÍNDICE DE FIGURAS

		Pág.
Fig. 1.1:	Reactor de Tanque agitado continuo (TAC)	1.3
Fig. 1.2:	Escenario posible en el proceso	1.4
Fig. 2.1:	Representación gráfica de un sistema dinámico	
Fig. 2.1(a):	Variables de estado en función del tiempo para el sistema (2.5)	2.3
Fig. 2.1(b):	Mapa de fases para el sistema (2.5)	2.3
Fig. 2.2:	Superficies de nivel de la función de Lyapunov en \mathfrak{R}^2	2.9
Fig. 2.3:	Estimación del DA para el sistema (2.27)	2.15
Fig. 3.1:	DA para la solución del problema (3.3)	3.3
Fig. 4.1:	Significado de las soluciones locales y globales del problema (4.4)	4.3
Fig. 4.2:	Función de Lyapunov y su derivada con respecto al tiempo para el sistema (4.5)-(4.6)	
Fig. 4.2(a):	$V(\mathbf{x})$ (negra), $dV(\mathbf{x})/dt$ (gris), asíntota (gris claro)	4.5
Fig. 4.2(b):	Conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = 2.2086$ (sólida), $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos) y el DA (sólida gruesa)	4.5
Fig. 4.2(c):	Vista lateral de $V(\mathbf{x})$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt$ (trazos) con $x_2 = 0$	4.5
Fig. 4.2(d):	Vista lateral de $V(\mathbf{x})$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt$ (trazos) con $x_2 = 0$	4.5
Fig. 4.3:	Soluciones falsas del sistema (4.5)-(4.6)	
Fig. 4.3(a):	$c = 0.1$	4.7
Fig. 4.3(b):	$c = 0.1287$	4.7

Fig. 4.3(c):	$c = 2.8$	4.7
Fig. 4.3(d):	$c = 4.7652$	4.7
Fig. 4.4:	Condición 1. Contacto tangencial entre los conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos)	4.10
Fig. 4.5:	Condición 2. Signo estrictamente positivo sobre el numerador y el denominador de la función de Lyapunov	
Fig. 4.5(a):	$N(\mathbf{x}) > 0$ (gruesa a trazos)	4.11
Fig. 4.5(b):	$D(\mathbf{x}) > 0$ (sombreada)	4.11
Fig. 4.6:	Región de intersección entre $N(\mathbf{x}) > 0$ y $D(\mathbf{x}) > 0$	
Fig. 4.6(a):	Solución deseada incluida	4.11
Fig. 4.6(b):	Soluciones falsas excluidas	4.11
Fig. 4.7:	Ejemplo 1. Conjunto de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos)	
Fig. 4.7(a):	Solución, $c = 28.7343$	4.14
Fig. 4.7(b):	Solución falsa, $c = 43.2379$	4.14
Fig. 4.8:	Ejemplo 2. Conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos)	4.15
Fig. 4.9:	Ejemplo 3. Conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos)	
Fig. 4.9(a):	Conjuntos de nivel: $V(\mathbf{x})$ (gris), $dV(\mathbf{x})/dt$ (blanco)	4.17
Fig. 4.9(b):	Plano x_1-x_2 con $x_3 = -1.3328$	4.17
Fig. 4.9(c):	Plano x_1-x_3 con $x_2 = 1.7120$	4.17
Fig. 4.9(d):	Plano x_2-x_3 con $x_1 = -1.0661$	4.17
Fig. 4.10:	Diagramas de bifurcación para el sistema (4.12)	
Fig. 4.10(a):	Diagrama de bifurcación en el plano $S - r$	4.19
Fig. 4.10(b):	Diagrama de bifurcación en el plano $I - r$	4.19
Fig. 4.11:	Retratos de fase para el sistema (4.12)	

Fig. 4.11(a):	Retrato de fases para $r = 0.87$ E1: (7.95, 0.67); E2(6.14, 1.16)	4.20
Fig. 4.11(b):	Retrato de fases para $r = 0.6$ E1: (10.21, 0.30); E2(4.78, 1.78)	4.20
Fig. 4.12:	Ejemplo 4. Conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos)	
Fig. 4.12(a):	Solución, $c = 12.9345$	4.21
Fig. 4.12(b):	Detalle sobre la solución	4.21
Fig. 4.13:	DA y estimación del DA(E ₂) para el sistema (4.12)	4.22
Fig. 4.14:	Reactor de tanque agitado continuo (TAC)	4.22
Fig. 4.15:	Isonulas y puntos de equilibrio para el sistema (4.13)	4.24
Fig. 4.16:	Ejemplo 5. Conjunto de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos)	
Fig. 4.16(a):	Solución, $c = 639.5575$	4.25
Fig. 4.16(b):	Solución falsa, $c = 840.1966$	4.25
Fig. 4.17:	DA y estimación del DA del punto de máxima conversión para el sistema (4.13)	4.26
Fig. 5.1:	No diferenciable del mínimo autovalor del ejemplo de Overton	5.3
Fig. 5.2:	Resultados para el sistema (5.2)	5.5
Fig. 5.3:	Solución al problema (5.4)	
Fig. 5.3(a):	Solución al problema interno	5.8
Fig. 5.3(b):	Solución al problema externo (Punto solución y solución falsa)	5.8
Fig. 5.4:	Ramas de la solución del problema (5.5)	5.9
Fig. 5.5:	Algoritmo de solución para la formulación (5.6)	5.12
Fig. 5.6:	Resultados para el Ejemplo 1	
Fig. 5.6(a):	Caso base	5.16
Fig. 5.6(b):	Caso óptimo	5.16

Fig. 5.7:	Resultados para el Ejemplo 2.	
Fig. 5.7(a):	Caso base	5.18
Fig. 5.7(b):	Caso óptimo	5.18
Fig. 5.8:	Resultados para el Ejemplo 3.	
Fig. 5.8(a):	Caso base	5.20
Fig. 5.8(b):	Caso óptimo	5.20
Fig. 5.9:	Ciclos límites para el Ejemplo 3.	5.20
Fig. 5.10:	Resultados para el Ejemplo 4.	
Fig. 5.10(a):	Primer caso	5.22
Fig. 5.10(b):	Segundo caso	5.22
Fig. 5.10(c):	Tercer caso	5.22
Fig. 6.1:	Resultados para el sistema de fermentación	
Fig. 6.1(a):	Lazo abierto	6.4
Fig. 6.1(b):	Lazo cerrado	6.4
Fig. 6.2:	Simulación dinámica del proceso de fermentación	
Fig. 6.2(a):	Lazo abierto	6.6
Fig. 6.2(b):	Lazo cerrado	6.6
Fig. 6.3:	Diagrama esquemático del sistema reactor – separador – reciclo	6.7
Fig. 6.4:	Isonulas y dominio de atracción	
Fig. 6.4(a):	Problema (6.13)	6.14
Fig. 6.4(b):	Problema (5.6)	6.14
Fig. 6.5:	Bola B_r (sólida), superficie $\frac{\ \mathbf{f}_1(\mathbf{x})\ }{\ \mathbf{x}\ } - \frac{1}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0$ (trazos)	
Fig. 6.5(a):	Problema (6.13) en variables de desviación $x_1 = z - z_s, x_2 = \theta - \theta_s$	6.14
Fig. 6.5(b):	Problema (5.6) en variables de desviación $x_1 = z - z_s, x_2 = \theta - \theta_s$	6.14

Fig. 6.6:	Simulación dinámica del proceso reactor – separado – recicló	
Fig. 6.6(a):	Problema (6.13)	6.16
Fig. 6.6(b):	Problema (5.6)	6.16

ÍNDICE DE TABLAS

	Pág.
Tabla 2.1: Clases de equilibrio de un sistema dinámico del tipo (2.4)	2.5
Tabla 4.1: Propiedades físicas y parámetros del sistema (4.13)	4.23
Tabla 5.1: Datos y resultados para el ejemplo (Ec. 5.2)	5.5
Tabla 5.2: Datos y resultados para el Ejemplo 1	5.16
Tabla 5.3: Datos y resultados para el Ejemplo 2	5.17
Tabla 5.4: Datos y resultados para el Ejemplo 3	5.19
Tabla 5.5: Datos y resultados para el Ejemplo 4	5.22
Tabla 6.1: Variables y parámetros del modelo del proceso de fermentación (6.1)-(6.2)	6.3
Tabla 6.2: Datos y resultados para el sistema de fermentación	6.5
Tabla 6.3: Propiedades físicas y parámetros del modelo	6.8
Tabla 6.4: Resultados de diseño del sistema RSR	6.13

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN GENERAL

La necesidad de describir de manera precisa el comportamiento físico de sistemas y procesos con el fin de lograr su adecuado entendimiento, requiere de ecuaciones matemáticas de modelado de mayor o menor complejidad.

Si bien en algunos casos particulares resulta adecuada una descripción por medio de un modelo lineal, en general los sistemas son no lineales y por ende requieren de modelos más complejos para describir su comportamiento (Vidyasagar, 1993). Por esta razón es importante contar con metodologías de análisis y diseño que permitan abordar el estudio de este tipo de sistemas para efectuar un correcto planeamiento de su operación.

Por ejemplo, el diseño y análisis de sistemas de procesos químicos se tornan progresivamente más complejos debido a la creciente necesidad de integración en masa y energía de los equipos como consecuencia de mayores restricciones de calidad, de seguridad y medioambientales. Un ejemplo específico de esta situación es el típico proceso químico dado por el sistema reactor – separador – recicló. El diseño de este tipo de sistemas involucra una amplia gama de restricciones para asegurar una adecuada calidad de producto y costos de capital y operativos razonables.

Otros ejemplos de sistemas complejos los plantean los nuevos esquemas tecnológicos resultantes de la “intensificación de procesos” (reacción y separación simultánea). Estos diseños permiten una reducción considerable en los costos de capital y energéticos, simultáneamente con la mejora en las purzas de los productos. Por ejemplo, la destilación reactiva (Taylor y Krhisna, 2000), es un proceso donde la reacción y la separación se dan simultáneamente en un mismo equipo, aprovechando el calor generado por la mezcla reaccionante para llevar a cabo la separación. Otros ejemplos de intensificación de procesos son la extracción reactiva, la fermentación extractiva y los procesos que involucran reactores de membrana (Reay y col., 2008). Por lo tanto, un análisis del comportamiento dinámico no

lineal de este tipo de sistemas se vuelve imprescindible para garantizar su correcto diseño y operación. Cabe mencionar que el comportamiento no lineal complejo es también una característica de los modelos matemáticos que describen interacciones de los sistemas biológicos y biomédicos, los cuales están tomando cada día mayor relevancia científica e industrial.

En el marco de esta tesis, se proponen metodologías para el diseño y análisis de sistemas dinámicos no lineales en general, con aplicaciones específicas a sistemas de la ingeniería química.

Las metodologías propuestas se basan en elementos de la teoría de estabilidad de Lyapunov, sobre cuya base se calculan estimaciones de dominios de atracción de puntos de equilibrio asintóticamente estables mediante el uso de diferentes técnicas de optimización.

Estas metodologías se aplican posteriormente al diseño de sistemas dinámicos basados en la optimización del dominio de atracción del punto de equilibrio operativo. El objetivo es determinar un conjunto de parámetros (variables de diseño del sistema dinámico), tal que se logre una región de atracción amplia, de modo que el sistema sea flexible frente a las perturbaciones a las que pueda estar sometido.

1.1 Dominio de Atracción

A menudo no es suficiente establecer que un punto de equilibrio de un sistema dinámico es asintóticamente estable. En ocasiones puede llegar a ser más importante conocer el dominio de atracción de dicho punto (forma y tamaño), o al menos contar con una estimación de este.

El Dominio de Atracción (DA) o Región de Estabilidad Asintótica de un punto de equilibrio asintóticamente estable de un sistema dinámico, es la porción del espacio de estados donde se originan trayectorias que convergen a este punto. Desafortunadamente, en la mayoría de los casos, el DA es un conjunto de forma compleja (y posiblemente de tamaño infinito) que no admite representaciones analíticas.

Para apreciar la importancia de determinar el DA de un punto de equilibrio asintóticamente estable, considérese la operación a lazo abierto de un reactor tanque agitado continuo no

isotérmico donde tiene lugar la reacción $A \rightarrow B$. La Fig. 1.1 muestra un esquema de este sistema.

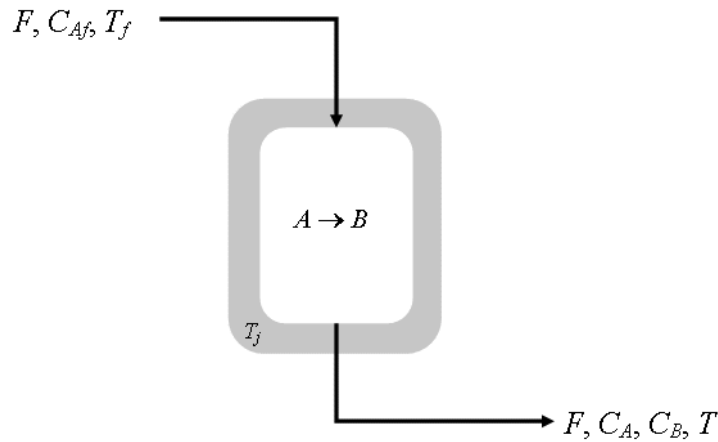


Fig. 1.1. Reactor de tanque agitado continuo (TAC)

El reactor opera a máxima conversión en un punto asintóticamente estable. Dicho punto se denota con el vector \mathbf{x}_1 , con elementos x_A (conversión del reactivo A) y T (Temperatura). Se considera, en primer lugar, que a partir de un dado tiempo inicial t_0 , tiene lugar una perturbación dada por una disminución en la temperatura del fluido refrigerante T_j . Como consecuencia, el sistema comienza a evolucionar hacia un nuevo estado \mathbf{x}_2 alejándose del punto \mathbf{x}_1 (flecha punteada en la Fig. 1.2).

Posteriormente, en un tiempo t_1 desaparece la perturbación y la temperatura del fluido refrigerante retorna a su valor inicial, por lo que el sistema presenta nuevamente el punto de equilibrio asintóticamente estable \mathbf{x}_1 . En el tiempo t_1 el estado del sistema $\mathbf{x}(t_1)$ se encuentra más o menos lejos del equilibrio \mathbf{x}_1 . El retorno o no a la operación de estado estable \mathbf{x}_1 depende de que $\mathbf{x}(t_1)$ pertenezca a la región de atracción de este punto.

Desde el punto de vista operativo, es importante determinar cuán lejos el punto $\mathbf{x}(t_1)$ puede llegar respecto de \mathbf{x}_1 mientras persiste la perturbación, es decir, durante el lapso de tiempo $(t_1 - t_0)$. Si esta diferencia es muy pequeña, debido a la continuidad de la solución con respecto a t , es muy probable que $\mathbf{x}(t_1)$ permanezca en la región de atracción de \mathbf{x}_1 . Sin embargo, el sistema de control del equipo requiere cierto tiempo para detectar la perturbación y contrarrestar sus efectos, por lo que el tiempo transcurrido hasta su eliminación puede ser significativo.

El tiempo disponible para eliminar la perturbación antes que el sistema abandone el DA, se denomina tiempo crítico t_c . En el caso en que se conociera exactamente el dominio de atracción de \mathbf{x}_1 (región blanca en la Fig. 1.2), se puede definir t_c como el tiempo en el cual $\mathbf{x}(t_1)$ alcanza la frontera de esta región.

Por otra parte, si no se conoce la representación exacta del DA, como es el caso más habitual, una estimación del mismo permitiría calcular un tiempo crítico estimado, denotado por t_c^* . Una estimación posible del DA está dado, por ejemplo, por la región delimitada por la curva cerrada en la Fig. 1.2. Como se puede apreciar, el tiempo t_c^* es menor o igual t_c , dado que la estimación del DA se encuentra completamente dentro del verdadero DA.

Una situación operativa desfavorable para el proceso sería que no se lograra eliminar la perturbación antes del tiempo crítico (t_c). Esto implicaría que después de eliminada la perturbación, el sistema evolucionará hacia el otro punto de equilibrio, denotado por \mathbf{x}_2 en este ejemplo. Este estado corresponde a una situación de mínima conversión, que es una situación claramente indeseable para el proceso (flecha a trazos en la Fig. 1.2).

La anterior discusión ilustra la importancia del concepto de dominio de atracción para el correcto planeamiento de la operación de un sistema dinámico. Además, el ejemplo pone de manifiesto la importancia de disponer de una buena estimación del DA, si no es posible contar con el verdadero DA.

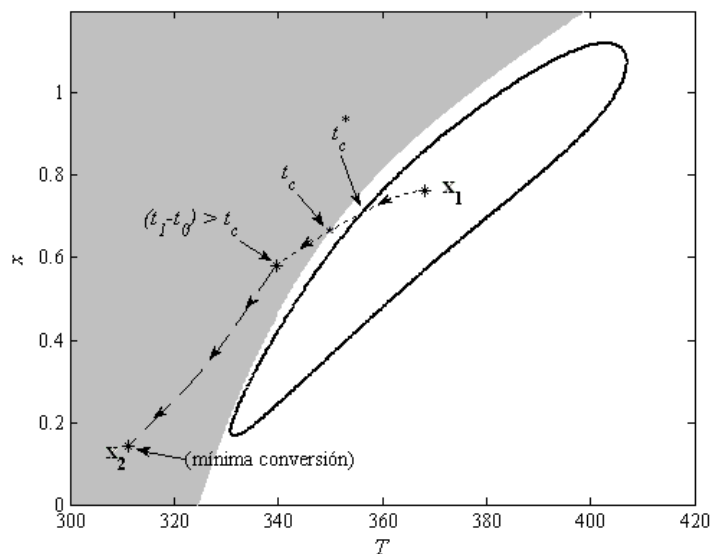


Fig. 1.2: Escenario posible en el proceso

1.2 Temática y Estructura de la Tesis

En esta tesis se desarrollan metodologías para la estimación de dominios de atracción basadas en elementos de la teoría de estabilidad de Lyapunov. Las estimaciones corresponden a conjuntos de nivel de funciones de Lyapunov contenidos en la región donde su derivada con respecto al tiempo tiene definición negativa.

El problema, formulado como un modelo de optimización, es de difícil resolución debido a la complejidad introducida por las no linealidades del sistema dinámico, el tipo de función candidata de Lyapunov seleccionada y por el requerimiento de optimalidad global de las soluciones. Para resolver estos inconvenientes, se propone el uso de técnicas de optimización determinística global, las cuales utilizan un algoritmo del tipo *branch and bound*. Además, se propone incorporar restricciones especiales al problema de optimización para evitar la convergencia a soluciones erróneas. Las funciones de Lyapunov utilizadas son del tipo racional, las cuales constituyen aproximaciones de las llamadas funciones de Lyapunov maximales y proporcionan mejores estimaciones de los DA que otros tipos de funciones.

Posteriormente, se propone la formulación del problema de diseño del sistema dinámico, con el objetivo de optimizar una medida indirecta del dominio de atracción del punto de operación del proceso, correspondiente a un punto de equilibrio asintóticamente estable. De esta forma se consigue que el sistema posea un DA amplio, lo que le otorga una mayor flexibilidad para retornar a su estado operativo inicial ante posibles perturbaciones que pueda sufrir, por ejemplo, frente a “pulsos” en los parámetros operativos.

El procedimiento propuesto se basa en la formulación de un problema de optimización en dos niveles. En el nivel interior se resuelve a optimalidad global el problema de estimación del DA para cada realización de las variables de diseño, las cuales son optimizadas en el nivel exterior. Por otra parte, con el fin de superar los inconvenientes que introduce la no diferenciabilidad del problema interno, se utiliza un algoritmo de tipo estocástico para manipular las variables de diseño en el nivel exterior. Se presentan una gran variedad de ejemplos donde se ilustran los aspectos importantes de las metodologías propuestas. Específicamente, la metodología de diseño se aplica al diseño de un sistema reactor – separador – reciclado (que representa un proceso típico y de gran relevancia en ingeniería química) y al control de un fermentador de dos estados.

A continuación, se describe brevemente la estructura de esta tesis.

En el Capítulo 2, se introducen los elementos básicos de la teoría de sistemas dinámicos no lineales, con especial énfasis en la teoría de estabilidad de Lyapunov, para el cálculo de la estimación de dominios de atracción de un punto de equilibrio asintóticamente estable. El propósito de este capítulo es presentar los aspectos teóricos, definiciones y teoremas más relevantes que serán utilizados en los desarrollos de la tesis.

En el Capítulo 3 se revisan las contribuciones más relevantes en lo que respecta a diseño-para-estabilidad y a la determinación de estimaciones de dominios de atracción de puntos de equilibrio asintóticamente estables.

En el Capítulo 4, se desarrolla una metodología para la estimación de dominios de atracción mediante un enfoque de optimización global, basada en funciones de Lyapunov de tipo racional. Se desarrollan ejemplos típicos obtenidos de la literatura, además de varios ejemplos de aplicación.

Sobre la base de los resultados del capítulo anterior, en el Capítulo 5 se propone una metodología para el diseño de sistemas dinámicos no lineales. La misma se basa en la optimización de una métrica relacionada con la extensión del dominio de atracción.

En el Capítulo 6, se aplica la metodología propuesta en el Capítulo 5, al diseño de un controlador proporcional de un fermentador continuo. El objetivo es mejorar las características operativas del sistema, a través de la extensión del DA del sistema controlado con respecto a las correspondientes a las del sistema a lazo abierto. También en este capítulo, se aplica la metodología de diseño a un proceso típico en ingeniería química como lo es el sistema reactor – separador – reciclado. El punto de operación obtenido y su dominio de atracción son comparados con los correspondientes a los de un problema de diseño-para-estabilidad con función objetivo económica.

Finalmente, en el Capítulo 7 se presentan las conclusiones de la tesis y se proponen áreas de trabajo futuro en base a la experiencia obtenida durante el desarrollo de la misma.

CAPÍTULO 2

CONCEPTOS MATEMÁTICOS PRELIMINARES

2.1 Introducción

En este capítulo se introducen conceptos básicos de la teoría de análisis de sistemas dinámicos no lineales, con especial énfasis en los elementos de la teoría de estabilidad de Lyapunov. Específicamente, se proporcionan las definiciones y teoremas principales que fundamentan esta teoría, orientados a la estimación de dominios de atracción de puntos de equilibrio asintóticamente estables. Además, se expone la metodología para la obtención de funciones de Lyapunov de tipo racional propuesta por Vannelli y Vidyasagar (1985), que permite estimar en general buenas aproximaciones del dominio de atracción de un sistema, y para algunos casos particulares, el DA real.

Los conceptos se presentan de manera informal y sin demostraciones rigurosas. La mayoría de los conceptos descritos en este capítulo, pueden hallarse en textos clásicos de análisis de sistemas no lineales como Khalil (1996), Vidyasagar (1993) y Hahn (1967).

2.2 Dinámica de Sistemas no Lineales

La dinámica de sistemas no lineales se puede representar a través de sistemas de ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden en el espacio de estados, $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$, Ec. (2.1):

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= f_1(t, x_1, x_2, \dots, x_n, v_1, v_2, \dots, v_p) \\ \frac{dx_2}{dt} &= f_2(t, x_1, x_2, \dots, x_n, v_1, v_2, \dots, v_p) \\ &\vdots \\ \frac{dx_n}{dt} &= f_n(t, x_1, x_2, \dots, x_n, v_1, v_2, \dots, v_p) \end{aligned} \tag{2.1}$$

donde t es la variable tiempo, x_1, x_2, \dots, x_n son las variables de estado y v_1, v_2, \dots, v_p son las variables de entrada que comprenden los parámetros del sistema y sus variables manipuladas. En notación vectorial, el sistema (2.1) puede expresarse como:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) \quad (2.2)$$

Esta representación en el espacio de estados, variante en el tiempo (debido a la dependencia con t de los parámetros del sistema) y forzada (debido a la presencia de \mathbf{v}), provee una descripción general y versátil de la dinámica de un sistema.

Un sistema invariante (autónomo), cuando $\mathbf{f}(\cdot)$ no depende explícitamente de t , es un caso especial de (2.2):

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \quad (2.3)$$

Una representación no forzada de (2.3) surge cuando la entrada \mathbf{v} no esta presente en forma explícita en la ecuación de estados:

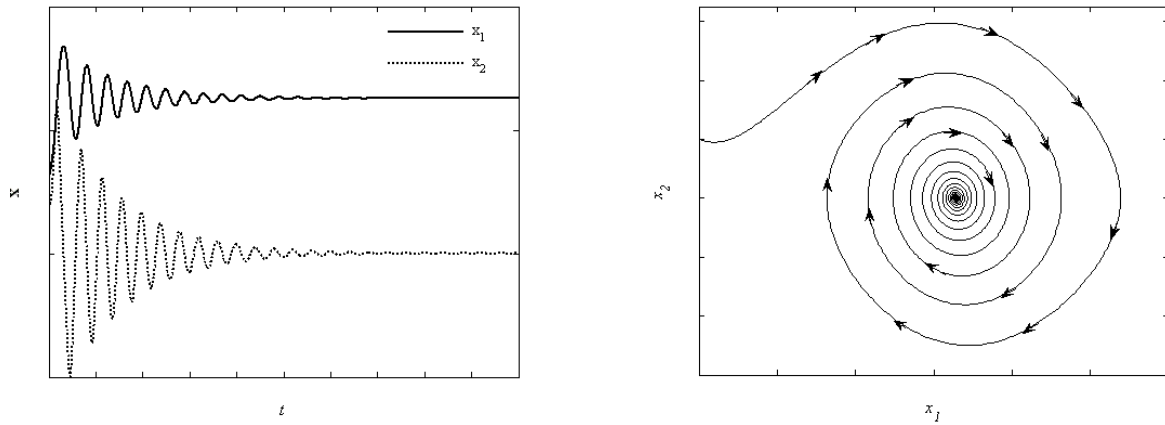
$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) \quad (2.4)$$

La representación (2.4) se da cuando no existen entradas externas al sistema, o cuando éstas se asumen constantes durante el análisis.

Un sistema dinámico puede representarse gráficamente mostrando la evolución de cada una de las variables de estado con respecto al tiempo, así como también, utilizando el tiempo como parámetro en un mapa de fases (ver Fig. 2.1). Para ilustrar lo anterior, se considera el siguiente sistema oscilante correspondiente al modelo de un péndulo, donde g es la aceleración de la gravedad y k es el coeficiente de rozamiento. Los estados x_1 y x_2 representan posición y velocidad angular respectivamente.

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= -g[\text{sen}(x_1)] - kx_2 \end{aligned} \quad (2.5)$$

En la Figs. 2.1(a) y (b), se muestran trayectorias del sistema dinámico (2.5) a condiciones iniciales arbitrarias y valores constantes de los parámetros.



(a) Variables de estado en función del tiempo para el sistema (2.5)

(b) Mapa de fases para el sistema (2.5)

Fig. 2.1: Representación gráfica de un sistema dinámico

Se puede observar en la Fig. 2.1(a) y (b) que a medida que transcurre el tiempo, el sistema representado por la Ec. (2.5) evoluciona hacia un estado de equilibrio (situación de reposo).

El concepto de estado de equilibrio (punto de equilibrio), es de fundamental importancia en la representación del espacio de estados. Un punto en el espacio de estados $\mathbf{x} = \mathbf{x}_e$, es un punto de equilibrio del sistema invariante no forzado (2.4) si se verifica que:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_e) = \mathbf{0} \quad (2.6)$$

Dado que la representación (2.6) es un sistema general de ecuaciones algebraicas no lineales, el sistema dinámico puede tener varios puntos de equilibrio aislados para una dada realización del vector de parámetros y manipulaciones (multiplicidad de estados estacionarios). El cálculo de todos los puntos de equilibrio del sistema (2.6) no es una tarea sencilla y se han propuesto diferentes estrategias para abordar este problema (Maranas y Floudas, 1995; Tsoulos y Stavrakoudis, 2009).

La naturaleza de los puntos de equilibrio con respecto a su estabilidad, está determinada localmente por el tipo (real o complejo) y por el signo de la parte real de los autovalores de la

matriz Jacobiana del sistema dinámico. El Teorema 2.1, permite caracterizar los puntos de equilibrio de un sistema no lineal a través del estudio de su versión linealizada.

Sin pérdida de generalidad, en los desarrollos subsiguientes se considera al origen de coordenadas como un punto de equilibrio del sistema dinámico representado por la Ec. (2.4).

Teorema 2.1. Sea $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ un punto de equilibrio del sistema no lineal descrito por la Ec. (2.4), donde $\mathbf{f} : \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{R}^n$ es continuamente diferenciable y \mathbb{R} es una región alrededor del origen. Sea,

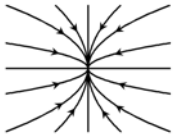
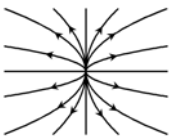
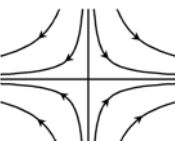
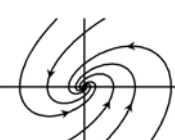
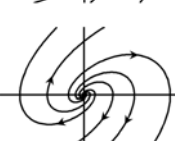
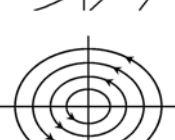
$$\mathbf{A} = \left(\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}}(\mathbf{x}) \right)_{\mathbf{x}=\mathbf{0}} \quad (2.7)$$

la matriz Jacobiana del sistema de ecuaciones (2.6) y $\lambda_i(\mathbf{A})$ los autovalores de \mathbf{A} , entonces,

- i.* El origen es asintóticamente estable si $\text{Re}[\lambda_i(\mathbf{A})] < 0$ para todos los autovalores de \mathbf{A} .
- ii.* El origen es inestable si $\text{Re}[\lambda_i(\mathbf{A})] > 0$ para uno o más de los autovalores de \mathbf{A} .

La Tabla 2.1, ilustra las varias clases de puntos de equilibrio para sistemas de segundo orden.

Tabla 2.1. Clases de equilibrio de un sistema dinámico del tipo (2.4)

Autovalores de A	Tipo de equilibrio	Mapa de fases
λ_1, λ_2 reales negativos	Nodo estable	
λ_1, λ_2 reales positivos	Nodo inestable	
λ_1, λ_2 reales, $(\lambda_1\lambda_2) < 0$	Silla	
λ_1, λ_2 Complejo, $\text{Re}(\lambda_i) < 0$	Foco estable	
λ_1, λ_2 complejos, $\text{Re}(\lambda_i) > 0$	Foco inestable	
λ_1, λ_2 imaginarios puros	Centro	

Por otra parte, un punto de equilibrio asintóticamente estable posee un cierto vecindario a su alrededor en el cual se originan trayectorias que convergen a él. Esto significa que cualquier trayectoria iniciada dentro de ese entorno, se aproxima al equilibrio a medida que el tiempo tiende a infinito. Lo anterior se declara formalmente en la siguiente definición:

Definición 2.1. El punto de equilibrio $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ del sistema dinámico (3.4) es:

- estable si, para cada $\varepsilon > 0$, existe un $\delta = \delta(\varepsilon) > 0$, tal que:

$$\|\mathbf{x}(0)\| < \delta \Rightarrow \|\mathbf{x}(t)\| < \varepsilon, \quad \forall t \geq 0 \tag{2.8}$$

- inestable, si no es estable

- asintóticamente estable si es estable y se puede seleccionar δ tal que:

$$\|\mathbf{x}(\mathbf{0})\| < \delta \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{x}(t) = \mathbf{0} \quad (2.9)$$

Se han desarrollado varios métodos para calcular o estimar los DA de puntos de equilibrio asintóticamente estables. Una de las metodologías principales se basa en la Teoría de Estabilidad de Lyapunov.

2.3 Teoría de Estabilidad de Lyapunov

La Teoría de Estabilidad de Lyapunov juega un papel central en la teoría de sistemas. Esta teoría provee un enfoque basado en funciones de energía del sistema para abordar el estudio de la estabilidad de los puntos de equilibrio. Básicamente, si el sistema reduce su energía a medida que evoluciona con el tiempo, llegará a una condición de equilibrio dependiente de las condiciones iniciales de las que partió.

Por ejemplo, para el péndulo representado por la Ec. (2.5) (Khalil, 1996), la energía total $E(\mathbf{x})$ esta definida como la suma de las energías potencial (definida tal que $E(\mathbf{0}) = 0$) y cinética, esto es:

$$E(\mathbf{x}) = \int_0^{x_1} g[\text{sen}(y)]dy + \frac{1}{2}x_2^2 = \left[g(1 - \cos(x_1)) + \frac{1}{2}x_2^2 \right] \quad (2.10)$$

Cuando la fricción es despreciable ($k = 0$), el sistema es conservativo, esto es, no hay disipación de energía hacia los alrededores. De aquí que $E(\mathbf{x})$ es constante durante el movimiento del sistema y por lo tanto, $dE(\mathbf{x})/dt = 0$ a lo largo de las trayectorias. Puesto que, $E(\mathbf{x}) = c$ forma contornos cerrados alrededor de $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ para valores pequeños de c , se puede llegar a la conclusión que el origen es un punto de equilibrio estable según la Definición 2.1.

Cuando se tiene en cuenta la fricción ($k > 0$), la energía se disipará durante la evolución del sistema, esto es, $dE(\mathbf{x})/dt \leq 0$ a lo largo de sus trayectorias, lo que implica que el sistema alcanzará un estado de equilibrio ($\mathbf{x} = \mathbf{0}$) cuando el tiempo tienda a infinito. De la Definición 2.1 se puede concluir entonces, que el origen es un punto de equilibrio asintóticamente estable. Por lo tanto, examinando la evolución de la energía del sistema en el tiempo, es posible caracterizar su estabilidad.

El concepto de energía esta asociado naturalmente a los sistemas mecánicos, sin embargo, encontrar funciones que describan la energía para otros tipos de sistemas puede no ser una tarea sencilla. Sin embargo en 1892, *Aleksandr Mikhailovich Lyapunov* (Lyapunov, 1992), mostró que ciertas funciones especiales pueden ser utilizadas en lugar de funciones de energía para estudiar la estabilidad de los puntos de equilibrio.

Sea $V(\mathbf{x})$ una función tal que $V(\mathbf{x}): \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{R}$, es continuamente diferenciable y definida en un dominio $\mathbb{R} \subset \mathfrak{R}^n$ que contiene el origen como punto de equilibrio asintóticamente estable. La derivada de $V(\mathbf{x})$ con respecto al tiempo esta dada por:

$$\frac{dV(\mathbf{x})}{dt} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial V(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_i} \right) \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \right) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial V(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_i} \right) (\mathbf{f}_i(\mathbf{x})) = \left[\frac{\partial V(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \right]^T [\mathbf{f}(\mathbf{x})] \quad (2.11)$$

Como se aprecia en la Ec. (2.11), la derivada de $V(\mathbf{x})$ con respecto al tiempo depende del propio sistema dinámico, y por lo tanto, será distinta para diferentes sistemas. Si $\phi(\mathbf{x}, t)$ es la solución de (2.4) que comienza en un estado inicial \mathbf{x}_0 en un tiempo $t = 0$, entonces:

$$\frac{dV(\mathbf{x})}{dt} = \left[\frac{dV[\phi(\mathbf{x}, t)]}{dt} \right]_{t=0} \quad (2.12)$$

Por consiguiente, si $dV(\mathbf{x})/dt$ es negativa, la función $V(\mathbf{x})$ decrecerá a lo largo de las soluciones de (2.4). Formalmente, el Teorema de Estabilidad de Lyapunov se postula como:

Teorema 2.2 (*Teorema de Estabilidad de Lyapunov*). Sea $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ un punto de equilibrio de (2.4), $\mathbb{R} \subset \mathfrak{R}^n$ un dominio que contiene a dicho punto y $V(\mathbf{x}): \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{R}$ una función continuamente diferenciable tal que:

$$V(\mathbf{0}) = 0 \text{ y } V(\mathbf{x}) > 0 \text{ en } \{\mathbb{R} \setminus \mathbf{0}\} \quad (2.13)$$

$$\frac{dV(\mathbf{x})}{dt} \leq 0 \text{ en } \{\mathbb{R} \setminus \mathbf{0}\} \quad (2.14)$$

entonces, $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ es estable. Además, si

$$\frac{dV(\mathbf{x})}{dt} < 0 \text{ en } \{\mathbb{R} \setminus \mathbf{0}\} \quad (2.15)$$

entonces $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ es asintóticamente estable.

El teorema anterior enuncia que si existe una función $V(\mathbf{x})$ definida positiva en un entorno R del origen como punto de equilibrio del sistema dinámico (2.4), y su derivada temporal es semi-definida negativa (2.14) o definida negativa (2.15) en ese entorno, entonces el punto de equilibrio es estable o asintóticamente estable, respectivamente.

Definición 2.2 (Funciones definidas positivas y definidas negativas). Una función continuamente diferenciable $\varphi(\mathbf{x})$ definida en un dominio $R \subseteq \mathcal{R}^n$ que contiene el punto $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, se denomina definida positiva si se cumplen las siguientes condiciones:

- $\varphi(\mathbf{0}) = 0$
- $\varphi(\mathbf{x}) > 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \{R \setminus \mathbf{0}\}$

La función $\varphi(\mathbf{x})$ es negativa definida si $-\varphi(\mathbf{x})$ es positiva definida. El símbolo \succ (\prec) se emplea en este trabajo para denotar funciones definidas positivas (negativas).

Una función $V(\mathbf{x})$ que cumple con el Teorema 2.2 se denomina función de Lyapunov. Toda función que describe la energía de un sistema es una función de Lyapunov, aunque lo contrario no siempre es cierto, es decir, no toda función de Lyapunov es una función de energía. Adicionalmente, una superficie de nivel $V(\mathbf{x}) = c$, para algún $c > 0$ se denomina superficie de Lyapunov.

El Teorema 2.2 se ilustra a continuación haciendo uso de las superficies de Lyapunov. La Fig. 2.2, muestra superficies de Lyapunov para valores arbitrarios de c .

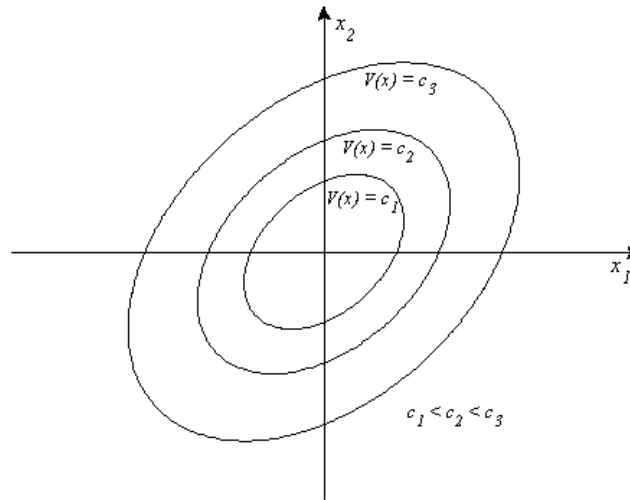


Fig. 2.2: Superficies de nivel de la función de Lyapunov en \mathfrak{R}^2

La condición $dV(\mathbf{x})/dt \leq 0$, implica que cuando una trayectoria cruza una superficie de Lyapunov $V(\mathbf{x}) = c$, esta permanece en el interior del conjunto $\Omega = \{\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n \mid V(\mathbf{x}) \leq c\}$.

Cuando $dV(\mathbf{x})/dt < 0$, la trayectoria se mueve de una dada superficie de Lyapunov a otra con un valor de c más pequeño. A medida que c decrece, la superficie $V(\mathbf{x}) = c$ se torna más pequeña, lo que demuestra que la trayectoria se aproxima al punto de equilibrio a medida que transcurre el tiempo. Una característica importante del Teorema de Estabilidad de Lyapunov es que sus condiciones son solo suficientes, (Khalil, 1996).

2.4 Funciones de Lyapunov de Tipo Cuadrático

Una clase de función escalar comúnmente empleada que cumple con las características del Teorema de Estabilidad de Lyapunov es la función cuadrática, expresada matemáticamente por la Ec. (2.16),

$$V(x) = \mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p_{ij} x_i x_j \quad (2.16)$$

donde \mathbf{P} es una matriz simétrica real. La función $V(\mathbf{x})$ es definida positiva, si y solo si, todos los autovalores de \mathbf{P} son positivos, lo que equivale a que todos los menores principales de \mathbf{P} son positivos (Noble y Daniel, 1989).

Para una función “candidata” de Lyapunov de tipo cuadrática (2.16), $dV(\mathbf{x})/dt$ en forma exacta para el sistema linealizado y localmente válida para el sistema no lineal, viene dada por:

$$\frac{dV(\mathbf{x})}{dt} = \mathbf{x}^T \mathbf{P} \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \right) + \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \right)^T \mathbf{P} \mathbf{x} = \mathbf{x}^T (\mathbf{P}\mathbf{A} + \mathbf{A}^T \mathbf{P}) \mathbf{x} = -\mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} \quad (2.17)$$

donde \mathbf{Q} es una matriz simétrica definida por:

$$\mathbf{A}^T \mathbf{P} + \mathbf{P} \mathbf{A} = -\mathbf{Q} \quad (2.18)$$

La ecuación (2.18) se conoce como Identidad de Lyapunov. Cabe notar que se pueden obtener diferentes funciones de Lyapunov de tipo cuadrático dependiendo de la selección de la matriz \mathbf{Q} .

Los siguientes teoremas proporcionan las condiciones para la existencia de una función de Lyapunov de tipo cuadrático.

Teorema 2.3 (Identidad de Lyapunov). Si el equilibrio $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ del sistema dinámico (2.4) es asintóticamente estable, entonces existe una función de Lyapunov de tipo cuadrático, $V(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{x}$, donde \mathbf{P} es una matriz definida positiva la cual puede ser calculada mediante la denominada Identidad de Lyapunov (2.18).

Teorema 2.4 Una matriz \mathbf{A} es *Hurwitz*, esto es, $\text{Re}[\lambda_i(\mathbf{A})] < 0$, si y sólo si, para una dada matriz simétrica definida positiva \mathbf{Q} , existe una matriz simétrica definida positiva \mathbf{P} que satisface la identidad de Lyapunov (2.18). Además, si \mathbf{A} es *Hurwitz*, entonces \mathbf{P} es la única solución de (2.18).

2.5 Estimación del Dominio de Atracción

En general no es suficiente establecer que un sistema dinámico dado tenga un punto de equilibrio asintóticamente estable. También suele ser importante conocer el dominio de

atracción de este punto, o al menos contar con una estimación. La Teoría de Estabilidad de Lyapunov proporciona elementos para estimar el DA de puntos de equilibrio asintóticamente estables.

Definición 2.3 (*Dominio de atracción*) Sea el origen $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ un punto de equilibrio asintóticamente estable para el sistema no lineal (2.4),

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) \quad (2.4)$$

donde $\mathbf{f} : \mathbb{R} \rightarrow \mathfrak{R}^n$ es localmente Lipschitz y $R \subset \mathfrak{R}^n$ es una región conteniendo el origen. Sea $\phi(t, \mathbf{x})$ la solución de (2.4) que comienza en un estado inicial \mathbf{x}_0 en un tiempo $t = 0$. El dominio de atracción del origen, denotado por S , se define como;

$$S = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R} \mid \phi(t, \mathbf{x}) \text{ esta definida } \forall t \geq 0 \text{ y } \phi(t, \mathbf{x}) \rightarrow \mathbf{0} \text{ cuando } t \rightarrow \infty \} \quad (2.19)$$

El siguiente teorema debido a La Salle (La Salle, 1960), establece las condiciones para calcular una estimación del dominio de atracción de un punto de equilibrio asintóticamente estable basado en la Teoría de Estabilidad de Lyapunov.

Teorema 2.5 (*Estimación del dominio de atracción*) Sea $V(\mathbf{x})$ una función de Lyapunov para el origen como punto de equilibrio asintóticamente estable del sistema (2.4). Considere que $dV(\mathbf{x})/dt$ es definida negativa en la región:

$$\Omega = \{ \mathbf{x} : V(\mathbf{x}) = c, c > 0 \} \quad (2.20)$$

Entonces, cada trayectoria inicializada dentro de la región Ω tiende a $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ cuando el tiempo tiende a infinito. Por lo tanto, una superficie de nivel de una función de Lyapunov, contenida en la región de definición negativa de derivada temporal, es una estimación del DA.

Una forma de determinar esta estimación es expresar el sistema como:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{f}_1(\mathbf{x}) \quad (2.21)$$

donde \mathbf{A} es la matriz Jacobiana evaluada en el origen y $\mathbf{f}_1(\mathbf{x})$ comprende la parte no lineal de $\mathbf{f}(\mathbf{x})$.

Seleccionando una matriz \mathbf{Q} definida positiva, se puede calcular una función de Lyapunov de tipo cuadrático (2.16) mediante la resolución de la identidad de Lyapunov (2.18). La derivada de la función de Lyapunov con respecto al tiempo está dada por:

$$\frac{dV(\mathbf{x})}{dt} = \mathbf{x}^T (\mathbf{A}^T \mathbf{P} + \mathbf{P} \mathbf{A}) \mathbf{x} + 2\mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{f}_1(\mathbf{x}) = -\mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} + 2\mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{f}_1(\mathbf{x}) \quad (2.22)$$

Es posible demostrar (Vidyasagar, 1993) que:

$$-\mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} \leq \lambda_{\min}(\mathbf{Q}) \|\mathbf{x}\|^2 \quad (2.23)$$

$$|\mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{f}_1(\mathbf{x})| \leq \lambda_{\max}(\mathbf{P}) \|\mathbf{x}\| \|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\| \quad (2.24)$$

De aquí,

$$\begin{aligned} \frac{dV(\mathbf{x})}{dt} &\leq \lambda_{\min}(\mathbf{Q}) \|\mathbf{x}\|^2 + 2\lambda_{\max}(\mathbf{P}) \|\mathbf{x}\| \|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\| \\ &= \|\mathbf{x}\| [2\lambda_{\max}(\mathbf{P}) \|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\| - \lambda_{\min}(\mathbf{Q}) \|\mathbf{x}\|] \end{aligned} \quad (2.25)$$

La expresión (2.25) proporciona una condición sobre el signo de derivada temporal de $V(\mathbf{x})$. Operando algebraicamente es posible demostrar que dicha derivada será negativa en una región del espacio de estados delimitada por una bola B_r de radio $r > 0$ en la que se verifique la siguiente relación:

$$\frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{Q})}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})}, \quad \forall \mathbf{x} \in B_r \quad (2.26)$$

Luego es posible asegurar que cada conjunto de nivel (superficie de Lyapunov) de $V(\mathbf{x})$ contenida en B_r constituye una estimación del dominio de atracción S . Los resultados anteriores se formalizan a través del siguiente teorema (Vidyasagar, 1993):

Teorema 2.6 Considere que el sistema dinámico (2.4) puede ser representado como en la Ec. (2.21). Si se cumple la relación (2.26), $V(\mathbf{x})$ y su derivada con respecto al tiempo son positiva y negativa definidas respectivamente dentro de la bola B_r de radio r . Es claro que cuanto mayor sea la relación $\lambda_{\min}(\mathbf{Q})/2(\lambda_{\max}(\mathbf{P}))$, mayor podrá ser el valor de r para un determinado sistema.

Para ilustrar la aplicabilidad del teorema anterior, considérese el oscilador de *Van der Pol* (Ec. 2.27):

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= -x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= x_1 - x_2 + x_1^2 x_2\end{aligned}\tag{2.27}$$

cuyo único punto de equilibrio es el origen $\mathbf{x} = \mathbf{0}$. La linealización alrededor de este punto es:

$$\begin{bmatrix} \frac{dz_1}{dt} \\ \frac{dz_2}{dt} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \mathbf{A}\mathbf{z}\tag{2.28}$$

Los autovalores del sistema linealizado son $(-1 \pm \sqrt{3}i)/2$, por lo tanto el origen del sistema (2.28) es un punto de equilibrio asintóticamente estable. Resolviendo la identidad de Lyapunov (2.18) con $\mathbf{Q} = \mathbf{I}$ (matriz identidad) se obtiene una matriz \mathbf{P} :

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1.5 & -0.5 \\ -0.5 & 1 \end{bmatrix}$$

Los autovalores de \mathbf{P} son $(5 \pm \sqrt{5})/4$. De aquí, $\lambda_{\max}(\mathbf{P}) = (5 + \sqrt{5})/4 = 1.8090$. Para calcular una estimación del DA del origen del sistema (2.27) debe encontrarse una bola B_r de radio r tal que dentro de ella $V(\mathbf{x})$ sea definida positiva y $dV(\mathbf{x})/dt$ negativa definida. Esta condición esta dada por la relación (2.26).

En este caso la parte no lineal del sistema representado por la Ec. (2.27) es:

$$\mathbf{f}_1(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 0 \\ x_1^2 x_2 \end{bmatrix}$$

y entonces,

$$\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\| = |x_1^2 x_2|$$

de modo que:

$$\frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} = \frac{|x_1^2 x_2|}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} \leq \frac{1}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = \frac{2}{5 + \sqrt{5}}, \quad \forall \mathbf{x} \in B_r$$

El máximo radio de la bola B_r que satisface la condición (2.26) será el correspondiente a la intersección entre dicha bola y la función $\frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} = \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{Q})}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})}$ con $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ y $r > 0$. Para el sistema (2.27), se tiene que:

$$B_r = \left\{ x \in \mathfrak{R}^2 \text{ tal que } \frac{|x_1^2 x_2|}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} \leq \frac{2}{5 + \sqrt{5}} = 0.2764 \right\}$$

El valor máximo de r que cumple con la restricción anterior es $r = 0.8474$. En este punto, solo se reporta este valor para ilustrar el enfoque de estimación del dominio de atracción. El cálculo detallado del radio de la bola B_r se presenta en el Capítulo 5.

Dado que dentro de la bola calculada se verifican las condiciones de existencia de la función de Lyapunov, de acuerdo al teorema de La Salle es posible asegurar que cualquier superficie de nivel de esta función contenida dentro de B_r constituye una estimación del DA.

Puesto que las curvas de nivel de $V(\mathbf{x})$ son elipses ($L_c = \{\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^2, \text{ tal que } V(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{x} \leq c\}$), se debe determinar el valor de c de modo que la elipse asociada a esa superficie de nivel sea tangente a la bola de radio r . Esto ocurre cuando el vector \mathbf{x} coincide con la dirección del eje mayor de la elipse (que corresponde al autovector asociado al menor autovalor de \mathbf{P}) y el modulo de \mathbf{x} vale r (es decir, está sobre la bola B_r). Por lo tanto, el valor de c vendrá dado por $c = r^2 \lambda_{\min}(\mathbf{P})$. Para este ejemplo $c = 0.4961$.

En la Fig. 2.3 se muestran los elementos de este ejemplo. El dominio de atracción real, representado por la región blanca, tiene como frontera un ciclo límite inestable alrededor del origen. La bola B_r se muestra con línea de trazos y la estimación del DA, correspondiente a la máxima superficie de nivel de la función de Lyapunov inscrita en B_r , se muestra en gris oscuro.

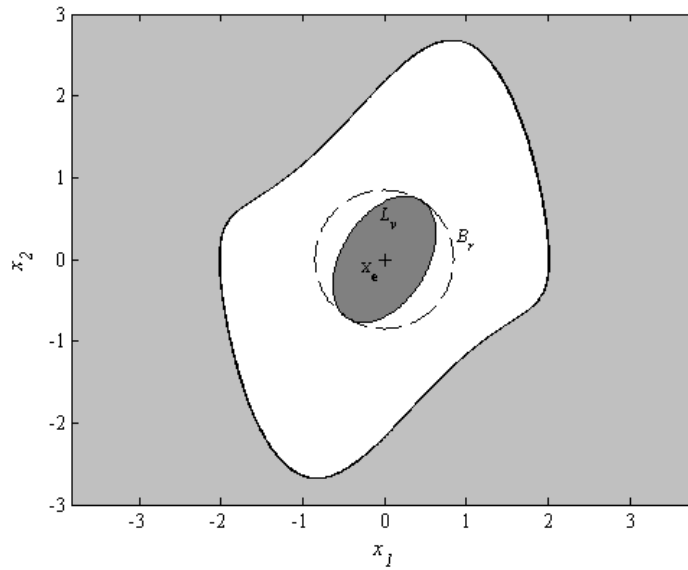


Fig. 2.3: Estimación del DA para el sistema (2.27)

Cabe notar que el uso de otros tipos de funciones de Lyapunov, diferentes de las típicas funciones cuadráticas, pueden brindar estimaciones menos conservadoras del dominio de atracción de los puntos de equilibrio. Desafortunadamente, no existe una metodología universal para la obtención de una función de Lyapunov que posibilite la determinación de buenas estimaciones del DA. Entre las diferentes alternativas, sin embargo, las funciones de Lyapunov de tipo racional suelen proporcionar estimaciones superiores, especialmente en las proximidades de la frontera del DA.

2.6 Funciones de Lyapunov de Tipo Racional

Una metodología bastante eficaz para el cálculo de buenas estimaciones de dominios de atracción, fue propuesta por Vannelli y Vidyasagar (1985) quienes probaron la existencia de las llamadas funciones de Lyapunov “maximales”. La propiedad fundamental de estas funciones es que tienden a infinito cuando el estado x se aproxima a la frontera ∂S del dominio de atracción S . Los autores también muestran en ese trabajo que dichas funciones pueden ser aproximadas por funciones racionales de acuerdo al procedimiento propuesto.

A continuación se describirá en detalle el procedimiento de construcción de una función de Lyapunov de tipo racional presentado en Vannelli y Vidyasagar (1985), puesto que, son la base para la metodología propuesta en el Capítulo 4 para la estimación de dominios de atracción de puntos de equilibrio asintóticamente estables.

Definición 2.4 Una función $V_m(\mathbf{x}) : \mathfrak{R}^n \rightarrow \mathfrak{R}_+ \cup \{\infty\}$ se llama función de Lyapunov maximal para el sistema (2.4) si verifica las siguientes condiciones:

- $V_m(\mathbf{0}) = 0, V_m(\mathbf{x}) > 0, \forall \mathbf{x} \in S, \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$
- $V_m(\mathbf{x}) < \infty$ si y solo si $\mathbf{x} \in S$
- $V_m(\mathbf{x}) \rightarrow \infty$ cuando $\mathbf{x} \rightarrow \partial S$ y/o $\|\mathbf{x}\| \rightarrow \infty$
- $dV_m(\mathbf{x})/dt$ está bien definida y es negativa definida sobre el conjunto S .

La definición anterior muestra la relación entre el DA de un punto de equilibrio asintóticamente estable y un conjunto sobre el cual una función dada satisface las propiedades de una función de Lyapunov maximal.

La construcción de funciones de Lyapunov maximales no es sencilla. Además, estas funciones no son únicas para un dado punto de equilibrio asintóticamente estable. Un indicio importante sobre la posible forma de la función maximal de Lyapunov está dada por la tercera condición de la Definición 2.4, esto es, el hecho que la función tiende a infinito cuando \mathbf{x} se aproxima a la frontera del DA.

Una función “candidata” de Lyapunov que verifica las propiedades de la Definición 2.4 tiene la siguiente expresión racional:

$$V(\mathbf{x}) = \frac{N(\mathbf{x})}{D(\mathbf{x})} \tag{2.29}$$

con el denominador $D(\mathbf{x})$ tendiendo a cero cuando \mathbf{x} se aproxima a ∂S . Además, se requiere que las funciones $N(\mathbf{x})$ y $D(\mathbf{x})$ sean analíticas, lo cual significa que pueden reemplazarse por sus correspondientes series de Taylor, de acuerdo a la siguiente expresión:

$$V(\mathbf{x}) = \frac{N(\mathbf{x})}{D(\mathbf{x})} = \frac{\sum_{i=2}^{\infty} R_i(\mathbf{x})}{1 + \sum_{i=1}^{\infty} Q_i(\mathbf{x})} \quad (2.30)$$

donde $R_i(\mathbf{x})$ y $Q_i(\mathbf{x})$ son polinomios homogéneos de grado i . También se asume que $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ se puede expresar a través de su serie de Taylor, esto es:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{\infty} F_i(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n \quad (2.31)$$

Para forzar que $dV(\mathbf{x})/dt$ sea definida negativa se la iguala a una función cuadrática definida negativa:

$$\frac{dV(\mathbf{x})}{dt} = (\nabla V(\mathbf{x}))^T \mathbf{f}(\mathbf{x}) = -\varphi(\mathbf{x}) = -\mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} \quad (2.32)$$

donde $\mathbf{Q} \succ 0$.

Operando algebraicamente:

$$\left[\left(1 + \sum_{i=1}^{\infty} Q_i(\mathbf{x}) \right) \sum_{i=2}^{\infty} (R_i(\mathbf{x}))^T - \left(\sum_{i=1}^{\infty} (Q_i(\mathbf{x}))^T \right) \sum_{i=2}^{\infty} R_i(\mathbf{x}) \right] \sum_{i=1}^{\infty} F_i(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} \left(1 + \sum_{i=1}^{\infty} Q_i(\mathbf{x}) \right)^2 \quad (2.33)$$

Comparando los monomios del mismo grado k del lado izquierdo y lado derecho de la ecuación (2.33), se obtiene las siguientes relaciones recursivas:

$$(\nabla R_2(\mathbf{x}))^T F_1(\mathbf{x}) = -\mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x}, \quad k = 2 \quad (2.34)$$

$$\begin{aligned} & (\nabla R_2(\mathbf{x}))^T F_{k-1}(\mathbf{x}) + \sum_{j=3}^k \left((\nabla R_j(\mathbf{x}))^T + \sum_{i=1}^{j-2} \left(Q_i(\mathbf{x}) (\nabla R_{j-1}(\mathbf{x}))^T - (\nabla Q_i(\mathbf{x}))^T R_{j-1}(\mathbf{x}) \right) \right) F_{k-j+1}(\mathbf{x}) \\ & = -\mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} \left(2Q_{k-2}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{k-3} Q_i(\mathbf{x}) Q_{k-2-i}(\mathbf{x}) \right), \quad k \geq 3 \end{aligned} \quad (2.35)$$

Una aproximación de $V(\mathbf{x})$ puede ser llevada a cabo truncando las series de (2.30) en un determinado grado finito. El siguiente teorema muestra que las aproximaciones resultantes también son funciones de Lyapunov.

Teorema 2.7 Considérese el sistema dinámico no lineal autónomo

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{\infty} F_i(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n \quad (2.36)$$

asumiendo que el sistema linealizado,

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = F_1(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (2.37)$$

es asintóticamente estable. Considere que las funciones homogéneas $R_i(\mathbf{x})$ y $Q_i(\mathbf{x})$ satisfacen las ecuaciones recursivas (2.34) y (2.35), entonces la función:

$$V_n(\mathbf{x}) = \frac{N_n(\mathbf{x})}{D_n(\mathbf{x})} = \frac{R_2(\mathbf{x}) + R_3(\mathbf{x}) + \dots + R_n(\mathbf{x})}{1 + Q_1(\mathbf{x}) + \dots + Q_{n-2}(\mathbf{x})} \quad (2.38)$$

es una función de Lyapunov para todo $n \geq 2$.

Las ecuaciones (2.34) y (2.35) constituyen un sistema de ecuaciones con las siguientes propiedades:

- i. El sistema es inherentemente indeterminado cuando se trata de calcular los coeficientes de los monomios en $R_i(\mathbf{x})$ y $Q_i(\mathbf{x})$. Esto significa que para un dado $n \in \mathbb{N}$, hay un número infinito de polinomios homogéneos $R_i(\mathbf{x})$ y $Q_i(\mathbf{x})$, $i = 1 \dots n$ que satisfacen (2.34) y (2.35), y por lo tanto, un número infinito de aproximaciones de $V_n(\mathbf{x})$ para la función maximal de Lyapunov.
- ii. No existe un método para definir, entre estas aproximaciones, la que proporcionará la mejor estimación del dominio de atracción.

Una forma de resolver las complicaciones introducidas por estas dos condiciones, es incluir nuevas restricciones a partir del hecho que la derivada con respecto al tiempo de $V_n(\mathbf{x})$ puede ser escrita de la siguiente manera:

$$\frac{dV_n(\mathbf{x})}{dt} = -\mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} + \frac{e(\mathbf{x})}{\left(1 + \sum_{i=1}^{n-2} Q_i(\mathbf{x})\right)^2} \quad (2.39)$$

donde $e(\mathbf{x})$ es la suma de los monomios de grados mayores que n . Además, se impone que $dV_n(\mathbf{x})/dt$ sea lo más similar posible a $dV_2(\mathbf{x})/dt$. Así se crea una nueva condición que puede ser formulada como un problema de optimización con las siguientes propiedades:

- La función objetivo a minimizar es $e(\mathbf{x})$, la cual refleja la influencia de los monomios de alto grado en la derivada con respecto al tiempo de $V_n(\mathbf{x})$.
- Las restricciones corresponden a las ecuaciones (2.34) y (2.35).

Para clarificar el procedimiento descrito anteriormente para la construcción de una función de Lyapunov del tipo (2.29), se establece el siguiente algoritmo recursivo.

Paso 1: Fijar $n = 2$ y utilizar la relación recursiva (2.34) que corresponde a la Identidad de Lyapunov (Ec. 2.18) para calcular los coeficientes de $R_2(\mathbf{x})$. Estos coeficientes corresponden entonces a los de una función de Lyapunov de tipo cuadrático.

$$V_2(\mathbf{x}) = R_2(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{x} \quad (2.40)$$

En este paso, el sistema de ecuaciones lineales resultante está acoplado y la función $e(\mathbf{x})$ de la derivada de la función de Lyapunov con respecto al tiempo (2.39) es igual a cero.

Paso 2: Definir una representación lineal para determinar los coeficientes de los monomios con $n \geq 3$:

$$\mathbf{A}_n \mathbf{y} = \mathbf{b}_n \quad (2.41)$$

El vector \mathbf{y} corresponde a los coeficientes de cada uno de los monomios contenidos en $R_i(\mathbf{x})$ y $Q_i(\mathbf{x})$ y el vector \mathbf{b}_n corresponde a los términos independientes que se obtienen de la relación de recurrencia (2.35). La matriz \mathbf{A}_n es de dimensión $m \times n$. Como se mencionó anteriormente, la relación recursiva (2.35) tiene varios grados de libertad.

Paso 3: Definir $e_n(\mathbf{y})$ como:

$$e_n(\mathbf{y}) = \|\text{terminos de grado } \geq n + 1\|_2^2 \quad (2.42)$$

La ecuación (2.42) corresponde a la norma 2 al cuadrado de los coeficientes de los términos del numerador de la Ec. (2.39). En este paso se plantea el siguiente problema de optimización:

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{y}} e_n(\mathbf{y}) \\ \text{s.a. } & \mathbf{A}_n \mathbf{y} = \mathbf{b}_n \end{aligned} \tag{2.43}$$

Paso 4: Usar la solución del problema (2.43) (\mathbf{y}^*) para definir los coeficientes de $R_n(\mathbf{x})$ y $Q_{n-2}(\mathbf{x})$. Si $e_n(\mathbf{y}^*)$ es lo suficientemente pequeño, ir a *paso 5*, si no, hacer $n = n + 1$ y volver al *paso 2*.

Paso 5: Si $e_n(\mathbf{y}^*) \leq \varepsilon$ ir al *paso 6*, si no, determinar el máximo valor de c que satisfaga el Teorema 2.5. (Si el valor de ε es nulo o muy cercano a cero, la aproximación del DA tiende al verdadero DA).

Paso 6: El conjunto,

$$\Omega_c = \left\{ \mathbf{x} : \sum_{i=1}^{n-2} Q_i(\mathbf{x}) > -1 \right\} \tag{2.44}$$

es una muy buena aproximación de S.

2.7 Consideraciones Finales

En este capítulo se introdujeron conceptos, definiciones y teoremas básicos de la teoría de sistemas no lineales. Estos elementos son utilizados en los capítulos siguientes para el desarrollo de metodologías de estimación de DA y de diseño de sistemas.

El uso de funciones de Lyapunov de tipo racional constituye una buena alternativa para la estimación de dominios de atracción. Si bien el DA de un punto de equilibrio asintóticamente estable puede llegar a ser un conjunto abierto (infinito), las estimaciones basadas en funciones racionales suelen proporcionar buenas aproximaciones en las proximidades de las fronteras del DA real. En el Capítulo 4, se propone una metodología para la estimación de dominios de atracción haciendo uso de este tipo de funciones.

La metodología descrita en la Sección 2.5 de este capítulo, se extiende en el Capítulo 5 para aplicarla al diseño de sistemas dinámicos no lineales basados en la optimización de una medida de la extensión del DA del punto de equilibrio operativo del sistema.

CAPÍTULO 3

INTRODUCCIÓN AL DISEÑO Y ANÁLISIS DE SISTEMAS DINÁMICOS NO LINEALES

3.1 Introducción

En este capítulo se realiza una revisión de las principales metodologías presentadas en la literatura para el diseño de sistemas bajo restricciones de estabilidad y para la estimación de dominios de atracción de puntos de equilibrio asintóticamente estables. Ambos enfoques pueden posteriormente combinarse, como se expondrá en el Capítulo 5, para desarrollar una metodología de diseño más general basada en la extensión del DA del punto operativo del sistema o proceso.

Los objetivos naturales del diseño de procesos son la optimalidad de algún criterio apropiado (generalmente económico), estabilidad (punto operativo localmente estable desde el punto de vista dinámico), flexibilidad (robustez bajo incertidumbre paramétrica) y controlabilidad (capacidad de retornar al estado de operativo frente a perturbaciones).

El objetivo es lograr un diseño satisfactorio desde el punto de vista de la operabilidad del proceso y óptimo según el criterio adoptado. La ausencia de requerimientos de operabilidad podría resultar, por ejemplo, en diseños que minimizan los costos de capital de un proceso, pero cuyo estado de operación corresponde a un punto de equilibrio inestable.

Aunque la operación de sistemas inestables a lazo abierto puede ser factible bajo una adecuada estrategia de control realimentado, en general es una situación indeseada que debería evitarse por diseño (Luyben y col., 1998). Este problema ha sido abordado en la disciplina de diseño-para-estabilidad, donde los aspectos de estabilidad se tienen en cuenta explícitamente en la formulación del diseño del proceso. Básicamente, el objetivo de este enfoque es determinar un punto de operación del sistema que sea asintóticamente estable, mientras se optimiza una función objetivo, generalmente de tipo económica (Blanco, 2003).

A modo de ilustración, considere el problema de diseño del siguiente sistema dinámico Ec. (3.1) (Kokosis y Floudas, 1994):

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= x_1^2 + x_2^2 - 0.9 = 0 \\ \frac{dx_2}{dt} &= x_1^2 + x_2 - 4u = 0\end{aligned}\tag{3.1}$$

El sistema tiene dos variables de estado (x_1 y x_2) y una variable de control (u), cada una con sus respectivos cotas o límites. Si el diseño del sistema se realiza minimizando una función objetivo, dada por $\varphi(\mathbf{x}) = x_2^2$, requiriendo únicamente la condición de estado estacionario, la formulación correspondiente es:

$$\begin{aligned}\min_{x_1, x_2, u} \varphi(\mathbf{x}) &= x_2^2 \\ \text{s. a. } x_1^2 + x_2^2 - 0.9 &= 0 \\ x_1^2 + x_2 - 4u &= 0 \\ 0 \leq u &\leq 1 \\ x_1 &\leq 0 \\ x_2 &\geq 0\end{aligned}\tag{3.2}$$

La solución del problema (3.2) es: $x_1 = -0.9487$, $x_2 = 0$, $u = 0.2250$ y $\varphi(\mathbf{x}) = 0$. En este punto de equilibrio óptimo (en el sentido de la función objetivo planteada), la matriz Jacobiana del sistema dinámico (\mathbf{A}) resulta no ser Hurwitz, es decir, la parte real de uno de sus autovalores es positiva ($\lambda_1 = -2$ y $\lambda_2 = 1$) y por lo tanto el punto de equilibrio correspondiente es inestable.

Para asegurar estabilidad asintótica de la solución, es posible incorporar al modelo de la Ec. (3.2) restricciones de estabilidad para forzar que la parte real de todos los autovalores de la matriz Jacobiana (\mathbf{A}) del sistema (3.1) tengan signo negativo:

$$\begin{aligned}\min_{x_1, x_2, u} \varphi(\mathbf{x}) &= x_2^2 \\ \text{s. a. } x_1^2 + x_2^2 - 0.9 &= 0 \\ x_1^2 + x_2 - 4u &= 0 \\ \text{Re}[\lambda_i(\mathbf{A}(\mathbf{x}))] &< 0 \\ 0 \leq u &\leq 1 \\ x_1 &\leq 0 \\ x_2 &\geq 0\end{aligned}\tag{3.3}$$

La solución del problema (3.3) es: $x_1 = -0.8061$, $x_2 = 0.5$, $u = 0.2875$ y $\varphi(\mathbf{x}) = 0.2532$. En este caso la matriz Jacobiana es Hurwitz, con los siguientes autovalores: $\lambda_1 = -0.6098$ y $\lambda_2 = -0.0021$. Claramente, esta solución posee un peor valor de la función objetivo como consecuencia de la incorporación de las restricciones de estabilidad, pero en contraposición se garantiza que el sistema operará en un punto de equilibrio asintóticamente estable.

Los resultados anteriores no permiten concluir nada con respecto a la robustez de esa solución frente a posibles perturbaciones que puedan afectar al sistema. Una medida de esa robustez está dada por la forma y la extensión del DA del punto de equilibrio operativo.

El DA para el punto solución del problema (3.3), se ilustra en la Fig. 3.1. Se puede notar que el punto de operación se encuentra ubicado muy cerca de la frontera de su DA (región blanca). Esta situación es claramente indeseable dado que, pequeñas perturbaciones en ciertas direcciones pueden “expulsar” el estado de la región de estabilidad asintótica.

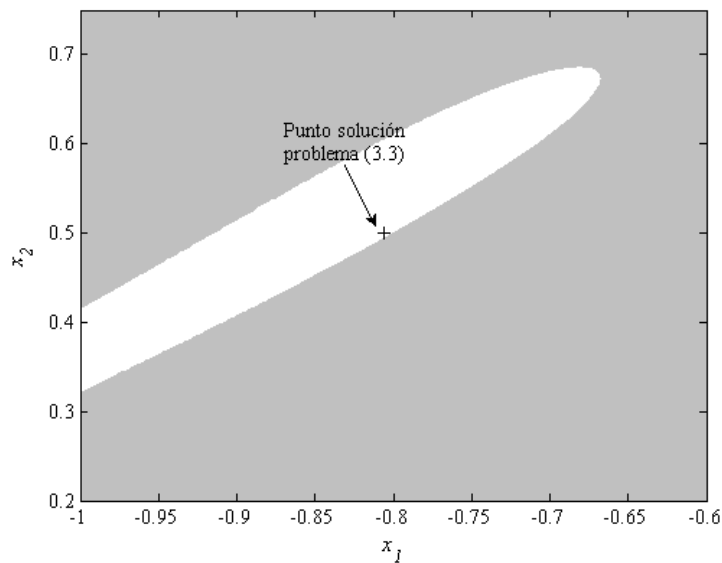


Fig. 3.1: DA para la solución del problema (3.3)

Por esta razón, es importante considerar en el problema de diseño las características del DA del punto de operación. Esto permitiría asegurar un buen desempeño del sistema frente a situaciones específicas como la señalada en el párrafo anterior.

En las siguientes secciones, se revisan algunos aspectos relevantes de los problemas de diseño-para-estabilidad y de estimación de dominios de atracción. En lo que respecta al problema de diseño-para-estabilidad se revén las contribuciones que aplican la optimización de autovalores. Con respecto a la estimación de dominios de atracción se revisan las contribuciones que aplican la Teoría de Estabilidad de Lyapunov. En todos los casos se citan y discuten brevemente los trabajos de mayor interés para esta tesis.

3.2 Diseño-para-Estabilidad

Ciertos aspectos del comportamiento de un sistema dinámico se pueden describir por medio de los autovalores de ciertas matrices. Estos proporcionan información local sobre la evolución en el tiempo del sistema, tanto en el espacio de estados, como en los dominios de Laplace y de frecuencia.

En general, no se trata simplemente de calcular los autovalores de una matriz dada. Los elementos de esta matriz pueden ser dependientes de una cantidad de parámetros (variables de diseño, de estado y manipuladas). En el marco de un problema de optimización, los autovalores pueden ser tanto parte de la función objetivo como de las restricciones (Blanco y Bandoni, 2003 y 2007).

El problema de diseño-para-estabilidad de sistemas dinámicos, ha sido planteado como un problema de optimización de autovalores en Ringertz (1997). Sin embargo, como se ha destacado en Kokossis y Floudas (1994), existe la dificultad práctica de obtener expresiones matemáticas explícitas para los autovalores de matrices de un tamaño superior a 4 por 4. Esto torna imposible incluir en una forma sencilla dentro de un problema de optimización los autovalores de matrices. Incluso en los casos que se pueden obtener expresiones analíticas, su frecuente no convexidad y potencial no diferenciabilidad, hace difícil para los algoritmos estándares de optimización no lineal resolver estos problemas.

Dentro de los trabajos más relevantes que han abordado el problema de diseño-para-estabilidad, se encuentra el elaborado por Kokossis y Floudas (1994). En este trabajo los autores desarrollan una metodología aplicable al diseño óptimo de procesos estables. Se propone un algoritmo iterativo para acotar los autovalores de la matriz Jacobiana, con el objetivo de asegurar estabilidad asintótica local. La metodología fue aplicada al problema de síntesis de redes de reacción complejas.

Ringertz (1997) presenta la resolución de diferentes problemas en ingeniería mecánica usando una técnica de optimización de autovalores, que se basa en un enfoque de transformación de barrera logarítmica.

Monningmann y Marquardt (2003) presentan una metodología de diseño que trata el problema de estabilidad haciendo uso de elementos de la teoría de bifurcación. Esta metodología fue aplicada en ese trabajo a procesos de polimerización continuos y posteriormente (Monningmann y Marquardt, 2005) a la sección de reacción del clásico proceso de hidrodealquilación de tolueno (más conocido por sus siglas en inglés, HDA).

Blanco y Bandoni (2003, 2007), sobre la base de las transformaciones de barrera logarítmica propuesta por Ringertz (1997), resuelven un problema con restricciones de negatividad sobre la parte real de los autovalores, mediante el uso de algoritmos NLP estándar. Estas técnicas fueron aplicadas posteriormente a sistemas químicos y bioquímicos en Matallana y col. (2008).

Chang y Sahinidis (2005) proponen un método de optimización global para localizar soluciones robustas de estado estable. El criterio de estabilidad de Routh-Hurwitz se emplea en ese trabajo para asegurar las características deseadas de estabilidad. La metodología propuesta se aplica a problemas de optimización de redes metabólicas, de modo que resulten estables para todo el espacio de incertidumbre paramétrica. Este enfoque puede generar soluciones conservadoras como fue reportado por Gerhard y col. (2008).

Ricardez-Sandoval y col. (2008) presentan un enfoque para integrar el diseño y el control de procesos. La idea es representar el comportamiento del sistema no lineal a lazo cerrado con parámetros inciertos aplicando, herramientas de control robusto para calcular fronteras de estabilidad y viabilidad del proceso. Esta metodología fue aplicada al diseño y control simultaneo de un tanque de mezclado.

Lu y col. (2010) desarrollan una metodología robusta para el diseño de procesos bajo incertidumbre. Se propone integrar el diseño óptimo con la asignación robusta de autovalores para diseñar el proceso en un punto de equilibrio asintóticamente estable. El uso de un algoritmo estocástico permite al método resolver problemas no convexos y no diferenciables.

3.3 Estimación de Dominios de Atracción (DA)

Los métodos de estimación de DA de puntos de equilibrios asintóticamente estables se pueden dividir en tres grupos: los basados en la ecuación de Zubov (Zubov, 1964), los que se basan en el teorema de La Salle (La Salle, 1960) y los métodos de no-Lyapunov. Genesio y col. (1985) proporcionan una clasificación amena de las diferentes técnicas y una revisión de los trabajos clásicos.

Los métodos basados en el teorema de La Salle, de principal interés para este trabajo, se basan en una extensión de la Teoría de Estabilidad de Lyapunov y constituyen la clase de métodos más aplicados para la estimación de DA. Como se estableció en el Teorema 2.5, las siguientes condiciones (Ec. 3.4) son necesarias para que una región Ω sea una estimación del DA:

$$\begin{aligned}
 & \text{(i)} \quad V(\mathbf{x}) > 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \\
 & \text{(ii)} \quad V(\mathbf{0}) = 0 \\
 & \text{(iii)} \quad \frac{dV(\mathbf{x})}{dt} \leq 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \\
 & \text{(iv)} \quad \frac{dV(\mathbf{0})}{dt} = \mathbf{0}
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

donde $V(\mathbf{x})$ es una función de Lyapunov. Estas condiciones, no garantizan que las trayectorias dinámicas del sistema se encuentren en su totalidad dentro de las regiones definidas por $dV(\mathbf{x})/dt = 0$.

El fundamento de la metodología es aproximar el DA por medio de un conjunto de nivel de la función de Lyapunov propuesta (superficie de Lyapunov). Básicamente la idea es encontrar el mayor conjunto de nivel de la función de Lyapunov, contenido en la región de definición negativa de la derivada temporal de dicha función. La calidad de la estimación del DA resultante dependerá por lo tanto de la función de Lyapunov adoptada.

Frecuentemente, las estimaciones obtenidas de esta forma son sensiblemente más pequeñas que el verdadero DA. Típicamente, DA de tamaño infinitos (conjuntos abiertos) son aproximados por conjuntos cerrados de tamaños finitos. Sin embargo, estas estimaciones pueden resultar buenas representaciones del DA real en ciertas partes del espacio de estados.

Entre las técnicas disponibles, en Vannelli y Vidyasagar (1985) se introducen funciones de Lyapunov de tipo racional para aproximar las funciones de Lyapunov maximales (ver Capítulo 2). En dichas funciones el denominador tiene un efecto “explosivo”, que hace crecer bruscamente el valor de la función cerca de la frontera del DA. El objetivo es obtener conjuntos de nivel que representan muy bien la región de estabilidad en esta parte del espacio de estados. Además, los autores proponen en ese trabajo un algoritmo recursivo para construir las funciones racionales y para calcular la estimación del DA. En algunos casos particulares, esta metodología puede determinar en forma exacta la región de estabilidad de un punto de equilibrio asintóticamente estable.

Chiang y Thorp (1989) desarrollan una metodología constructiva para estimar las regiones de estabilidad. La estrategia comienza con una función de Lyapunov y genera una secuencia de funciones de Lyapunov cada una de las cuales es utilizada para generar una estimación del DA. La secuencia de estimaciones pertenecen al DA real, y la unión de todas ellas resulta una estimación mucho mejor que la obtenida con las funciones de Lyapunov individuales.

Levin (1994) efectúa la estimación del DA haciendo uso de funciones de Lyapunov de tipo cuadrático, que dependen de un cierto vector de parámetros. El objetivo es determinar el valor de los parámetros que maximizan el área del conjunto de nivel que se encuentra en la región de definición negativa de la derivada temporal de la función de Lyapunov.

En Chiang y col. (1995) y Hiskens y Davy (1996) se propone un procedimiento sistemático para la construcción de funciones de energía que permiten caracterizar la frontera del DA. Estas funciones poseen propiedades similares a las funciones de Lyapunov. Los procedimientos propuestos fueron aplicados en esos trabajos al estudio de sistemas de potencia.

La mayoría de los métodos comentados, en general, proporcionan estimaciones de los DA muy conservadoras, o de aplicabilidad muy específica y por ende de limitada utilidad en otras disciplinas.

La estimación de DA a través de problemas de optimización es en general muy compleja, debido a que las formulaciones matemáticas resultantes son altamente no lineales y de tipo semi-infinito. A fin de superar la complejidad de las formulaciones semi-infinitas, algunos autores han sugerido discretizar el espacio de estados. Por ejemplo, Tibken y Hachicho (2000) utilizan el teorema de Ehlich-Zeller para calcular subconjuntos del DA de un punto de

equilibrio asintóticamente estable de sistemas polinomiales. Este teorema permite conocer el número mínimo de elementos de la grilla necesario para asegurar definición positiva y negativa de las funciones involucradas. El trabajo también presenta generalizaciones del teorema para polinomios multivariantes y trigonométricos.

Dentro de los métodos basados en optimización para sistemas dinámicos polinomiales, la contribución de Hachicho y Tibken (2002) sugiere el empleo de formulaciones basadas en la Teoría Matemática de Momentos, que requieren la resolución de un problema de optimización primal y uno dual, este último relacionado con la determinación del DA del punto de equilibrio.

En Chesi y col. (2002) y Chesi (2003 y 2004) se propone la estimación del DA de sistemas dinámicos con parámetros inciertos, por medio de la construcción de funciones polinómicas homogéneas de Lyapunov. La condición suficiente para la existencia de una función polinómica homogénea de Lyapunov de un grado determinado, se formula en términos de un problema de desigualdad matricial lineal (LMI) factible, maximizando el volumen de la estimación. Estas técnicas de optimización LMI son también aplicadas en Amato y col. (2007) a un modelo de crecimiento de población que involucra tres especies de organismos y en Merola y col. (2008) a un modelo de estado de latencia de tumores.

Papachistodoulou y Pragna (2002) proponen un procedimiento para probar estabilidad de equilibrios de sistemas no lineales que se basa en una relajación del método directo de Lyapunov, lo que posibilita una construcción algorítmica de la función de Lyapunov. La técnica está restringida a sistemas dinámicos que pueden representarse por medio de funciones polinomiales, aunque permite incluir restricciones de igualdad y desigualdad en términos de integrales, para contemplar ciertas no linealidades no polinómicas.

Posteriormente, en Papachistodoulou y Pragna (2005) se utilizan avances en programación semidefinida con el uso de técnicas de suma de cuadrados para examinar la no negatividad de las funciones de Lyapunov. Se presentan aplicaciones en ingeniería química y mecánica.

Kaslik y col. (2005) presentan un método de estimación de DA basado en una función analítica y su expresión en series polinomiales de Taylor. La función analítica y sus series polinómicas de Taylor son construidas mediante fórmulas de recurrencia, usando los coeficientes de las expansiones de las series de Taylor alrededor del punto de equilibrio.

Chesi (2007) propone una metodología para aproximar el DA como la unión de un número infinito de conjuntos de nivel de funciones de Lyapunov. Se define un parámetro dependiente de la función de Lyapunov y los conjuntos de nivel se calculan resolviendo un problema convexo de optimización LMI. Al igual que en contribuciones anteriores (Chesi y col., 2002), esta metodología se aplica a sistemas dinámicos no lineales de estructura polinomial.

Hachicho (2007) propone una técnica que permite la identificación del mejor conjunto de nivel de un sistema dinámico polinomial (que constituye una estimación del DA) mediante el uso de funciones de Lyapunov de tipo racional. La técnica hace uso de métodos de optimización determinística global, basada en la Teoría Matemática de Momentos.

Topcu y col. (2008) proponen una metodología utilizando información de simulaciones para generar una función candidata de Lyapunov. Estas funciones son evaluadas resolviendo un problema de optimización lineal de suma de cuadrados.

Chesi (2009) propone una estrategia para la estimación del DA de sistemas dinámicos que poseen funciones no polinomiales. La idea es convertir el sistema no polinomial en un sistema polinomial efectuando expansiones por series de Taylor. Luego, se resuelve el problema convexo aplicando técnicas de optimización LMI.

Además del problema de estimación del DA de un dado punto de equilibrio, también se ha trabajado en el problema de agrandamiento del DA de un sistema dado. La mayoría de estos trabajos asumen que el punto de equilibrio permanece asintóticamente estable dentro del rango de variación de los parámetros de optimización.

Tan (2006) propone resolver el problema de agrandamiento del DA usando herramientas de suma de cuadrados aplicado a sistemas dinámicos polinomiales. Hashemzadeh y Yazdanpanah (2006) desarrollan un enfoque para agrandar el DA de un sistema no lineal basado en el teorema de Zubov (Zubov, 1964). Gonzalez y Odloak (2009) y Limon y col. (2005) presentan métodos para agrandar el DA de un sistema no lineal sobre esquemas de modelos de control predictivo.

3.4 Consideraciones Finales

Las metodologías descritas para abordar el problema de diseño-para-estabilidad, si bien han constituido progresos importantes, no tienen en cuenta la extensión ni la forma del DA. Esto

podría ubicar el punto estacionario en una posición muy cercana a la frontera del DA, como se ilustró a través del sistema (3.1). Esta situación se considera no satisfactoria, ya que pequeñas perturbaciones en alguno de los parámetros, podrían fácilmente llevar el estado a una condición de la cual no pueda retornar al equilibrio deseado cuando el sistema recupere sus características topológicas originales. Por lo tanto, conocer la extensión y forma del DA de un punto de equilibrio, o al menos contar con una buena estimación de este, es imprescindible para garantizar la adecuada operabilidad del sistema o proceso.

Por otra parte, las metodologías utilizadas para la estimación del DA parten del hecho de que el punto de equilibrio está previamente definido, por ejemplo, a través de la solución de un problema de optimización en estado estacionario con restricciones de estabilidad. De acuerdo a nuestro conocimiento, no existen enfoques de diseño de sistemas dinámicos no lineales que garanticen simultáneamente estabilidad asintótica del estado estacionario y contemplen la extensión de su DA. En el Capítulo 5 se presentará una nueva metodología que tiene en cuenta ambos aspectos para el diseño de sistemas dinámicos no lineales.

CAPÍTULO 4

ESTIMACIÓN DE DOMINIOS DE ATRACCIÓN MEDIANTE OPTIMIZACIÓN GLOBAL

4.1 Introducción

En este capítulo se propone una metodología para la estimación de dominios de atracción de puntos de equilibrio asintóticamente estables, basada en funciones de Lyapunov de tipo racional.

La idea básica de la metodología, consiste en determinar la mayor superficie de nivel de una función de Lyapunov racional, que se encuentra completamente contenida en la región de definición negativa de su derivada temporal.

Con este objetivo, se formula un problema de optimización que incluye requerimientos de tangencia entre las superficies de nivel y restricciones en el signo del numerador y denominador de la función de Lyapunov. Estas restricciones permiten evitar una cantidad de “soluciones falsas” de la estimación del DA, que corresponden a mínimos locales de problema de optimización no lineal.

Además, dado que se requiere de condiciones de optimalidad global de la solución para producir una estimación apropiada del DA, se utiliza un algoritmo de optimización global determinístico de tipo branch and bound. La metodología propuesta se aplica a varios ejemplos para ilustrar los diferentes aspectos de este enfoque.

4.2 Estimación del DA como un Problema de Optimización

Considérese que se dispone de una función de Lyapunov $V(\mathbf{x})$ para el sistema dinámico (4.1),

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) \quad (4.1)$$

lo que significa que:

$$\begin{aligned} V(\mathbf{x}) > 0 \text{ en } R(\mathbf{0}) & \quad \text{a)} \\ \frac{dV(\mathbf{x})}{dt} < 0 \text{ en } R(\mathbf{0}) & \quad \text{b)} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Del Teorema 2.5, el cual establece que la superficie de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ contenida en la región de definición negativa de $dV(\mathbf{x})/dt$ constituye una estimación del DA, se concluye que el mayor conjunto de nivel (máximo valor de c) que verifica esta condición corresponde a la mejor estimación del DA que se puede obtener con $V(\mathbf{x})$.

El cálculo del máximo conjunto de nivel, se puede obtener por medio de la solución de un problema de optimización cuya formulación pseudo-matemática es:

$$\begin{aligned} \max_{c, \mathbf{x}} c & \\ \text{s.a. } \{ \mathbf{x} \text{ pertenece al conjunto de nivel } V(\mathbf{x}) - c = 0 \} & \quad \text{a)} \\ \{ \text{el conjunto } V(\mathbf{x}) - c \text{ esta contenido en } R(\mathbf{0}) \} & \quad \text{b)} \end{aligned} \quad (4.3)$$

El objetivo del problema (4.3), es determinar el máximo conjunto de nivel de $V(\mathbf{x})$ el cual está completamente contenido en la región de definición negativa de $dV(\mathbf{x})/dt$ (4.3(b)). Hachicho (2007) propone reformular el problema (4.3) como se indica a continuación:

$$\begin{aligned} \min_{c, \mathbf{x}} c & \\ \text{s.a. } V(\mathbf{x}) - c = 0 & \\ \frac{dV(\mathbf{x})}{dt} = 0 & \\ c > 0 & \end{aligned} \quad (4.4)$$

La solución de este problema es un punto en el espacio de estados que corresponde a un contacto tangencial entre las funciones $V(\mathbf{x}) = c$ y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$. Cabe aclararse, que el problema de optimización (4.4) es no lineal y por lo tanto puede tener varias soluciones locales. Con el fin de converger a una solución correcta se debe asegurar optimalidad global.

En la Fig. 4.1, se muestra gráficamente el significado que tienen las diferentes soluciones del problema (4.4). Las elipses corresponden a las superficies de Lyapunov ($V(\mathbf{x}) - c$), mientras que la interfase entre las regiones blanca y gris define la superficie de nivel $dV(\mathbf{x})/dt = 0$.

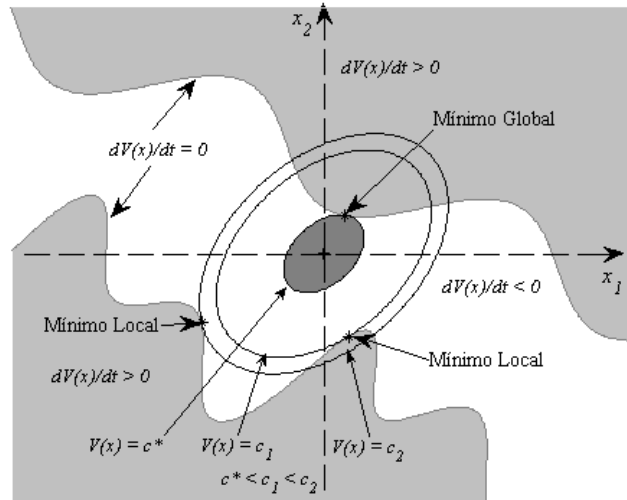


Fig. 4.1: Significado de las soluciones locales y globales del problema (4.4)

Puede apreciarse que existen soluciones correspondientes a un mínimo local que no son adecuadas, puesto que, la superficie de nivel de la función de Lyapunov se encuentra en una porción del espacio de estados donde no se verifica definición negativa de $dV(\mathbf{x})/dt$. Caso de las elipses $V(\mathbf{x}) = c_1$ y $V(\mathbf{x}) = c_2$. Por otra parte, se observa que la superficie de nivel correspondiente al mínimo global $V(\mathbf{x}) = c^*$ (región gris oscura), sí se encuentra totalmente incluida en la porción del espacio de estados donde $dV(\mathbf{x})/dt$ tiene definición negativa (región blanca).

Para ilustrar este enfoque de estimación del DA, se analiza el oscilador de *Van der Pol* (Vannelli y Vidyasagar, 1985):

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= x_1 - x_2 + x_1^2 x_2 \end{aligned} \tag{4.5}$$

donde el origen de coordenadas ($\mathbf{x} = \mathbf{0}$) es el punto de equilibrio asintóticamente estable. Considérese la siguiente función de Lyapunov de tipo racional para este sistema (Hachicho, 2007),

$$V(\mathbf{x}) = \frac{0.593x_1^2 - 0.364x_1x_2 + 0.437x_2^2 - 0.1253x_1^4 + 0.2885x_1^3x_2 - 0.0537x_1^2x_2^2 + 0.0581x_1x_2^3 - 0.0196x_2^4}{1 - 0.0001x_1 + 0.0001x_2 - 0.2685x_1^2 + 0.3217x_1x_2 - 0.1163x_2^2} \quad (4.6)$$

En la Fig. 4.2(a) se grafica dicha función y su derivada temporal (en negro y gris respectivamente). En gris claro se identifica la asíntota de la región del espacio de estados donde la función de Lyapunov no está definida. Para una mejor visualización de dichas funciones, en la Fig. 4.2(c) y (d) se muestran vistas laterales de $V(\mathbf{x})$ (línea sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt$ (línea a trazos).

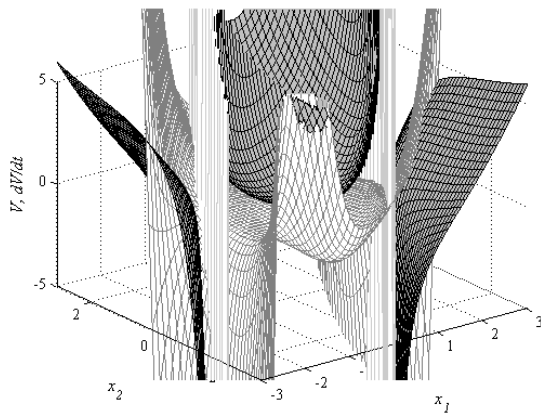
En la Fig. 4.2(b), se muestran los conjuntos de nivel de interés junto con el DA real (línea sólida gruesa). La curva cerrada $V(\mathbf{x}) = 2.2086$ (línea sólida) contenida en el conjunto de nivel $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (línea a trazos) constituye la solución deseada del problema (4.4) para el sistema bajo estudio (4.5) y por lo tanto representa la mejor estimación del DA que puede obtenerse con la función (4.6).

Cabe notar que en este caso particular, hay dos puntos en el espacio de estados para el mismo conjunto $V(\mathbf{x}) = c$ debido a simetría en las soluciones. Puesto que, ambas soluciones son equivalentes con respecto a la estimación resultante, sólo se reporta una de ellas.

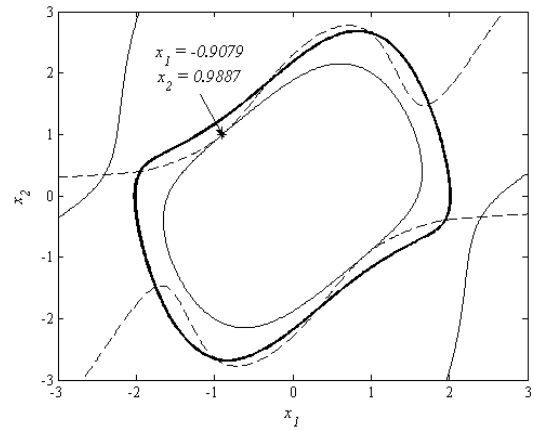
La metodología descrita requiere la disponibilidad de una función de Lyapunov para el sistema bajo estudio. Hachicho (2007) propone el uso de funciones racionales de Lyapunov en el problema de optimización (4.4). Como se explicó en el Capítulo 2, una función de Lyapunov del tipo racional tiene la siguiente estructura:

$$V(\mathbf{x}) = \frac{N(\mathbf{x})}{D(\mathbf{x})} = \frac{\sum_{i=2}^n R_i(\mathbf{x})}{1 + \sum_{i=1}^{n-2} Q_i(\mathbf{x})}$$

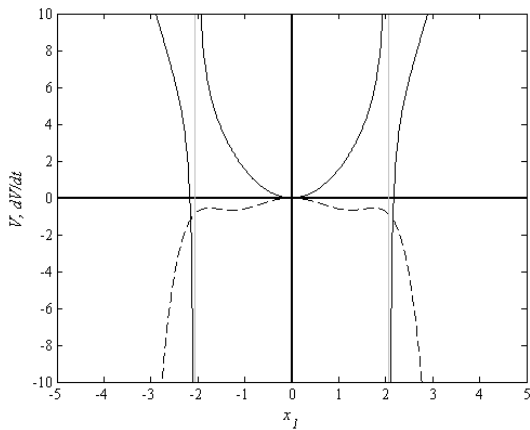
donde $N(\mathbf{x})$ y $D(\mathbf{x})$ son polinomios definidos a través de $R_i(\mathbf{x})$ y $Q_i(\mathbf{x})$, los cuales son polinomios homogéneos de grado i para $n \geq 2$.



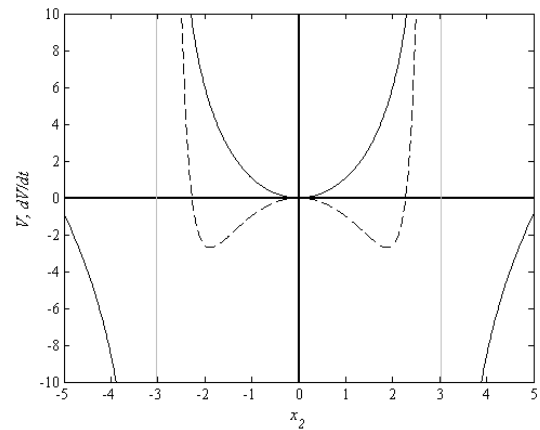
(a) $V(\mathbf{x})$ (negra), $dV(\mathbf{x})/dt$ (gris),
asíntota (gris claro)



(b) Conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = 2.2086$ (sólida)
y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos) y el DA (sólida gruesa)



(c) Vista lateral de $V(\mathbf{x})$ (sólida) y
 $dV(\mathbf{x})/dt$ (trazos) con $x_2 = 0$



(d) Vista lateral de $V(\mathbf{x})$ (sólida) y
 $dV(\mathbf{x})/dt$ (trazos) con $x_1 = 0$

Fig. 4.2: Función de Lyapunov y su derivada con respecto
al tiempo para el sistema (4.5)-(4.6)

4.3 Nueva Formulación para la Estimación del DA

Como fue mencionado anteriormente, el problema (4.4) es un modelo de optimización no lineal que puede tener varias soluciones locales que no constituyen estimaciones apropiadas del DA para el sistema bajo estudio (ver Fig. 4.1).

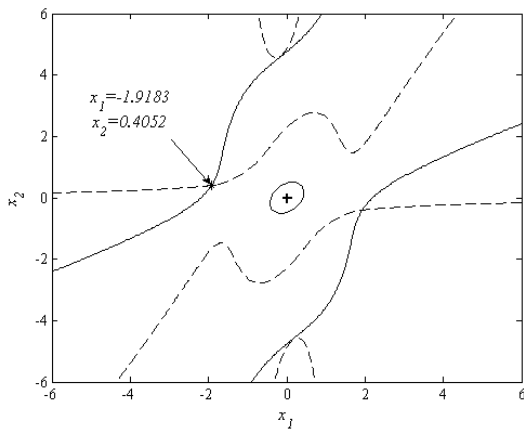
Considérese por ejemplo las diferentes soluciones del problema (4.4) para el sistema (4.5)-(4.6) que se ilustran en la Fig. 4.3. Las Figs. 4.3(a) a 4.3(d) muestran en línea sólida diferentes conjuntos de nivel de la función de Lyapunov (Ec. 4.6).

En todos los casos, el conjunto de nivel de la derivada con respecto al tiempo de la función de Lyapunov, se indica con línea a trazos. Se observa que por razones de simetría hay dos soluciones para un mismo $V(\mathbf{x}) = c$. Por lo tanto, sólo una de ellas se reporta en la descripción que sigue.

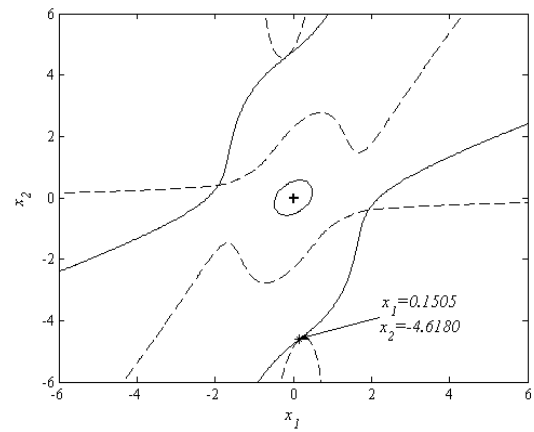
La solución representada en la Fig. 4.3(a) es una solución del problema (4.4) con un valor de c menor que el de la solución correspondiente a la estimación deseada, la cual se muestra en la Fig. 4.2(b). Esta solución esta dada por la intersección transversal entre el conjunto de nivel $V(\mathbf{x}) = 0.1$ y el conjunto de nivel $dV(\mathbf{x})/dt = 0$. Se puede notar, que la intersección entre los conjuntos de nivel tiene lugar lejos del origen y por lo tanto, sólo una muy pequeña porción del conjunto de nivel de $V(\mathbf{x})$ es de hecho una estimación del DA (círculo pequeño alrededor del origen).

A diferencia de la solución de la Fig. 4.3(a), la de la Fig. 4.3(b) verifica la intersección tangencial deseada entre los conjuntos de nivel. Sin embargo, la estimación del tamaño del DA es también conservadora, puesto que, el contacto entre los conjuntos de nivel tiene lugar en una región alejada del origen.

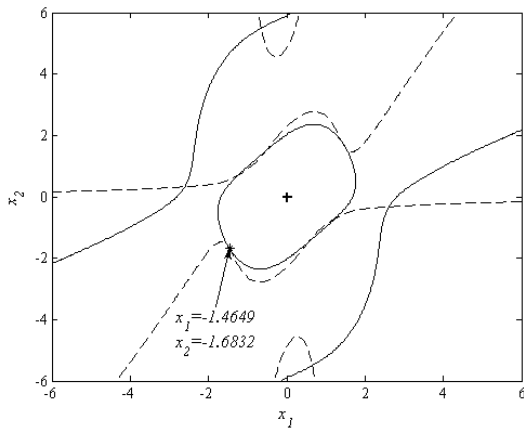
Se puede observar en ambas soluciones, que aunque se satisfacen las restricciones del problema (4.4), tanto $V(\mathbf{x})$ y $dV(\mathbf{x})/dt$ experimentan una transición de signos en una porción intermedia del espacio de estados (ver asíntota en la Fig. 4.2(a)). Específicamente, $V(\mathbf{x})$ es positiva definida en algún dominio alrededor del origen tornándose negativa en una zona intermedia y recuperando nuevamente el signo positivo lejos del origen (líneas sólida en la Fig. 4.2(c) y (d)).



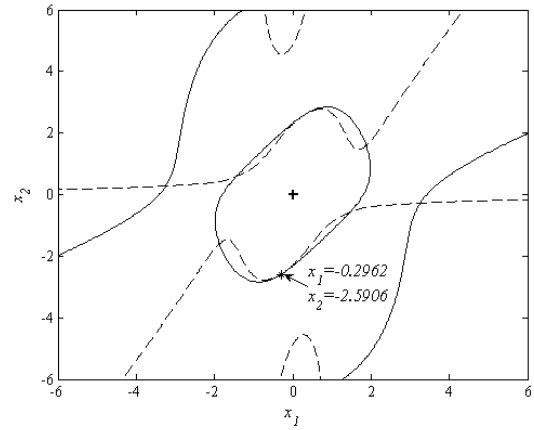
(a) $c = 0.1$



(b) $c = 0.1287$



(c) $c = 2.8$



(d) $c = 4.7652$

Fig. 4.3: Soluciones falsas del sistema (4.5)-(4.6)

Conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos)

De igual manera, $dV(\mathbf{x})/dt$ permanece con definición negativa cerca del origen pero se torna positiva a medida que se aleja de este (línea a trazos en Fig. 4.2(d)). Los pequeños círculos de las Fig. 4.3(a) y (b) son estimaciones del DA, ya que estos se encuentran completamente contenidos en la región de definición negativa de $dV(\mathbf{x})/dt$. Evidentemente, el hecho que la solución se encuentre más allá de la transición de signos de las funciones, es indeseable.

Los resultados ilustrados en las Fig. 4.3(c) y (d) son también soluciones del problema (4.4) dado que presentan intersecciones tangenciales entre los conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$. Sin embargo, ninguna de ellas es una estimación del DA ya que los respectivos conjuntos de nivel de $V(\mathbf{x})$ (línea sólida) no están completamente contenidos en la región de definición negativa de $dV(\mathbf{x})/dt$ (línea a trazos).

Dado que todas las soluciones de la Fig. 4.3 son soluciones válidas del problema (4.4) y ninguna es una estimación deseada del DA, todas ellas son consideradas como soluciones falsas para el sistema (4.5) con función de Lyapunov (4.6).

De las anteriores descripciones cualitativas se puede concluir que, para que cierto conjunto de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ sea una estimación óptima (deseada) del DA haciendo uso de funciones de Lyapunov de tipo racional, se deben verificar las siguientes tres condiciones:

Condición 1. Los conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ se intersectan tangencialmente.

Condición 2. La solución pertenece a la porción del espacio de estados previa a la transición de signos de $V(\mathbf{x})$ y $dV(\mathbf{x})/dt$ a medida que $\|\mathbf{x}\| \rightarrow \infty$.

Condición 3. El conjunto de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ es el mínimo global.

La condición 1, evita soluciones falsas como la que se muestra en la Fig. 4.3(a). La condición 2 asegura que las soluciones del tipo de la Fig. 4.2(b) se prefirieran a las de la Fig. 4.3(b). Finalmente, la condición 3, fuerza la obtención de soluciones del tipo de la Fig. 4.2(b) sobre las soluciones tangenciales falsas de las Fig. 4.3(c) y (d).

Si bien el problema (4.4) explícitamente requiere optimalidad global (condición 3), la condición 1 y la condición 2 no son consideradas. Por lo tanto, con el objeto de evitar la convergencia a alguna de las soluciones falsas previamente discutidas, se propone una nueva formulación (4.7) que excluye estas situaciones indeseables y asegura la identificación de la correcta solución de la estimación del DA para funciones racionales de Lyapunov.

$$\begin{aligned}
 & \min_{c, \mathbf{x}, \varepsilon} c \\
 \text{s.a. } & V(\mathbf{x}) = \frac{N(\mathbf{x})}{D(\mathbf{x})} & \text{a)} \\
 & V(\mathbf{x}) - c = 0 & \text{b)} \\
 & \frac{dV(\mathbf{x})}{dt} = 0 & \text{c)} \\
 & \frac{\partial[V(\mathbf{x}) - c]}{\partial x_i} = \varepsilon \frac{\partial \left[\frac{dV(\mathbf{x})}{dt} \right]}{\partial x_i}, \quad i = 1, \dots, n & \text{d)} \\
 & N(\mathbf{x}) > 0 & \text{e)} \\
 & D(\mathbf{x}) > 0 & \text{f)} \\
 & \mathbf{x} \neq 0 & \text{g)} \\
 & c > 0 & \text{h)}
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

La condición 1, esta impuesta explícitamente en la formulación como una restricción geométrica requiriendo que el punto solución de ambos conjuntos de nivel pertenezca al mismo hiper-plano en el espacio de estados. Esta restricción se expresa matemáticamente a través de la dependencia lineal de los gradientes de los conjuntos de nivel en el punto solución (4.7(d)), donde ε es una variable auxiliar y n es el número de estados del sistema dinámico. Usando notación vectorial, la restricción (4.7(d)) se puede expresar como:

$$\nabla[V(\mathbf{x}) - c] = \varepsilon \nabla \left[\frac{dV(\mathbf{x})}{dt} \right].$$

Esta condición de tangencia se ilustra en la Fig. 4.4 para el sistema bajo estudio. En la solución, los vectores normales al plano tangente son: $\nabla[V(\mathbf{x}) - c] = [-1.9838, 1.8135]^T$, $\nabla \left[\frac{dV(x)}{dt} \right] = [-0.8080, 0.7386]^T$ y el valor de ε es 2.4550.

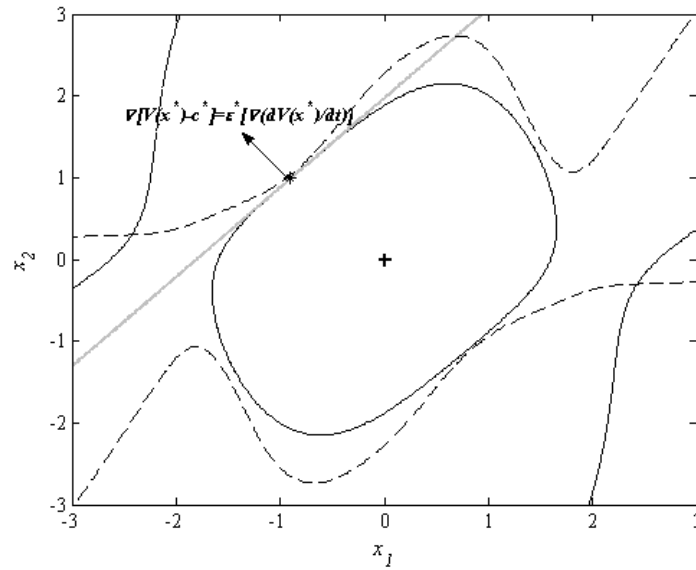
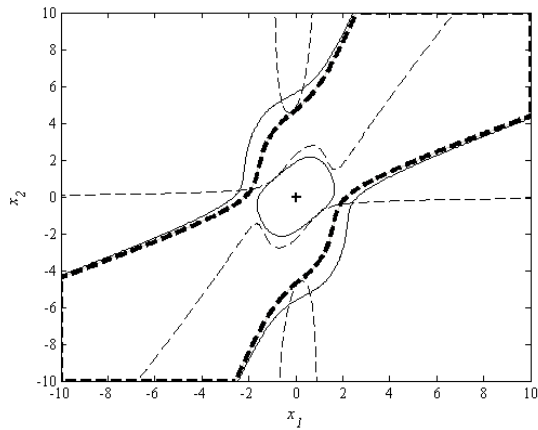


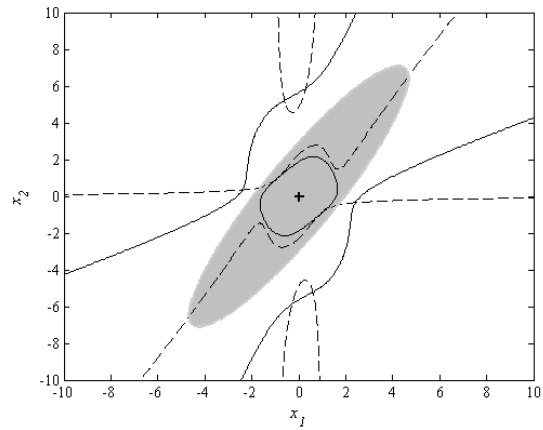
Fig. 4.4: Condición 1. Contacto tangencial entre los conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos)

Por otra parte, la condición 2 no posee expresiones matemáticas obvias para ser incluidas en el problema de optimización. En este trabajo, se propone incluir restricciones sobre los signos del numerador y del denominador de la función racional de Lyapunov (4.7a) de modo que los mismos sean estrictamente positivos, esto es $N(\mathbf{x}) > 0$ y $D(\mathbf{x}) > 0$ ((4.7e) y (4.7f)).

En la Fig. 4.5(a) se muestra la restricción $N(\mathbf{x}) > 0$ (región limitada por la línea gruesa a trazos) y en la Fig. 4.5(b) la correspondiente a $D(\mathbf{x}) > 0$ (región sombreada), para el sistema (4.5)-(4.6).



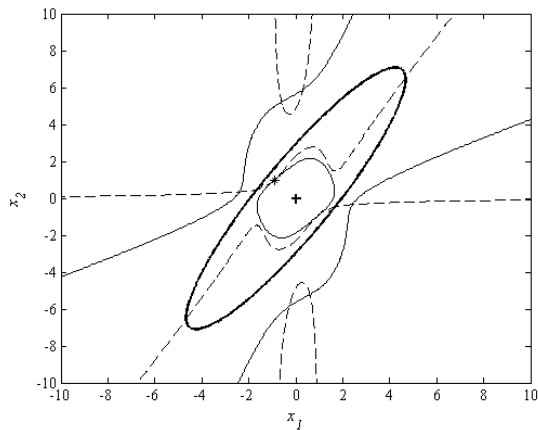
(a) $N(\mathbf{x}) > 0$ (guesa a trazos)



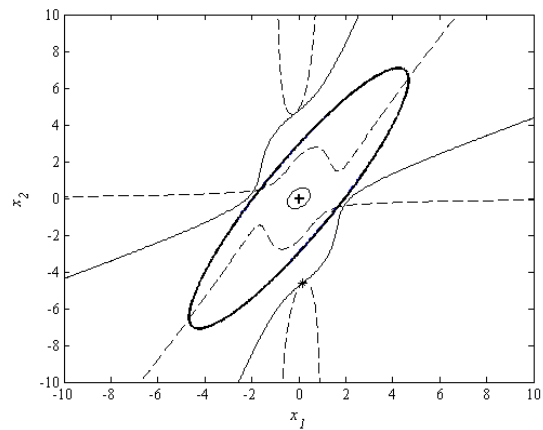
(b) $D(\mathbf{x}) > 0$ (sombreada)

Fig. 4.5: Condición 2. Signo estrictamente positivo sobre el numerador y el denominador de la función de Lyapunov

En la Fig. 4.6, se muestra la intersección entre las regiones definidas por las restricciones $N(\mathbf{x}) > 0$ y $D(\mathbf{x}) > 0$ (región limitada por la línea sólida gruesa). Dicha región contiene la solución deseada (Fig. 4.6(a)) y excluye las soluciones falsas mostradas en la Fig. 4.3(b) como se puede apreciar en la Fig. 4.6(b).



(a) Solución deseada incluida



(b) Soluciones falsas excluidas

Fig. 4.6: Región de intersección entre $N(\mathbf{x}) > 0$ y $D(\mathbf{x}) > 0$ (línea sólida gruesa)

Finalmente la condición 3 (optimalidad global), se asegura resolviendo el problema de programación no lineal (4.7) utilizando herramientas computacionales de optimización global. En particular, en esta tesis, se usa el paquete GAMS (GAMS, 2008a) con el programa de optimización global BARON (GAMS, 2008b). BARON implementa un algoritmo determinístico de optimización global del tipo branch and bound, el cual garantiza la convergencia a óptimos globales para una amplia gama de modelos no lineales. Para una presentación completa de la teoría detrás de BARON y los algoritmos de branch and bound, consultar Tawarmalani y Sahinidis (2002).

Las restricciones (4.7g) y (4.7h) se incluyen para evitar que la solución quede atrapada en el origen del espacio de estados la cual es una solución sin sentido para el problema bajo estudio.

Definiendo $\frac{dV(\mathbf{x})}{dt} = \frac{\hat{N}(\mathbf{x})}{\hat{D}(\mathbf{x})}$ y realizando manipulaciones algebraicas apropiadas, el problema

(4.7) se puede reformular en forma más compacta como se muestra en la Ec. (4.8):

$$\begin{aligned}
 & \min_{c, \mathbf{x}, \varepsilon} c \\
 s.a. \quad & N(\mathbf{x}) - cD(\mathbf{x}) = 0 & a) \\
 & \hat{N}(\mathbf{x}) = 0 & b) \\
 & \nabla[N(\mathbf{x}) - cD(\mathbf{x})] = \varepsilon \nabla[\hat{N}(\mathbf{x})] & c) \\
 & N(\mathbf{x}) > 0 & d) \\
 & D(\mathbf{x}) > 0 & e) \\
 & \mathbf{x} \neq 0 & f) \\
 & c > 0 & g)
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

4.4 Ejemplos de Aplicación de la Nueva Formulación

En esta sección se aplica el enfoque presentado en la sección anterior a la estimación del DA de cinco sistemas dinámicos obtenidos en la literatura. Los tres primeros son ejemplos matemáticos típicos, mientras que los dos restantes son aplicaciones a sistemas biomédicos e ingenieriles. Para cada sistema se construyó una función racional de Lyapunov según el procedimiento propuesto por Vanneli y Vidyasgar (1985), descrito en el Capítulo 2.

Para todos los ejemplos, en la representación gráfica de los resultados del problema (4.8), la línea sólida representa la curva $V(\mathbf{x}) - c = 0$ y la línea trazos la curva $dV(\mathbf{x})/dt = 0$. Las regiones determinadas por las restricciones $N(\mathbf{x}) > 0$ (4.8d) y $D(\mathbf{x}) > 0$ (4.8e) se indican mediante línea gruesa a trazos y región sombreada respectivamente.

4.4.1 Ejemplo 1: Sistema Polinomial de Dos Estados

Considérese el siguiente sistema (Genesio y col., 1985):

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -x_1 + x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= 0.1x_1 - 2x_2 - x_1^2 - 0.1x_1^3 \end{aligned} \quad (4.9)$$

La función de Lyapunov de tipo racional para este sistema está definida por medio de los siguientes polinomios:

$$\begin{aligned} R_2(\mathbf{x}) &= 0.5184x_1^2 + 0.3684x_1x_2 + 0.3421x_2^2 \\ R_3(\mathbf{x}) &= -0.0144x_1^3 - 0.1646x_1^2x_2 - 0.0143x_1^2x_2^2 - 0.0005x_2^3 \\ R_4(\mathbf{x}) &= 0.0303x_1^4 + 0.0043x_1^3x_2 + 0.0037x_1^2x_2^2 - 0.0012x_1x_2^3 \\ Q_1(\mathbf{x}) &= 0.2269x_1 + 0.0529x_2 \\ Q_2(\mathbf{x}) &= -0.0029x_1^2 - 0.0144x_1x_2 - 0.0026x_2^2 \end{aligned}$$

La Fig. 4.7(a) ilustra la estimación del DA del origen como punto de equilibrio asintóticamente estable para este sistema, obtenido por la resolución del problema (4.8).

Como es de esperarse, la solución verifica tangencia entre los conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ y está incluida en la intersección de las regiones $N(\mathbf{x}) > 0$ (línea a trazos) y $D(\mathbf{x}) > 0$ (región sombreada).

La intersección entre los conjuntos de nivel de interés se verifica en el punto $x_1 = 5.7952$ y $x_2 = -4.0719$ para un valor de $c = 28.7343$ y un valor de la variable auxiliar $\varepsilon = 0.3780$.

Para este sistema $N(\mathbf{x})$ es mayor que cero en todo el dominio considerado para la optimización, mientras la restricción sobre $D(\mathbf{x})$ cubre una gran parte de este. Nótese que existe una solución falsa cerca de la solución deseada (Fig. 4.7(b)). Esta solución es excluida efectivamente asegurando optimalidad global del problema (4.8).

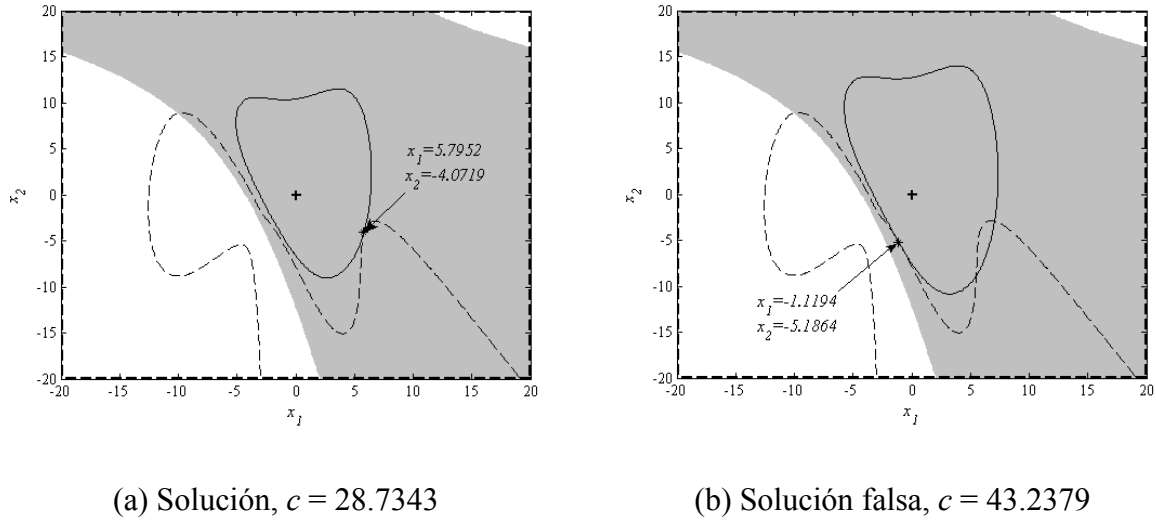


Fig. 4.7: Ejemplo 1. Conjunto de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos)

4.4.2 Ejemplo 2: Sistema no Polinomial de Dos Estados

Considérese el siguiente sistema (Chesi, 2009):

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -x_1 + x_2 + 0.5(\exp(x_1) - 1) \\ \frac{dx_2}{dt} &= -x_1 - x_2 + x_1x_2 + x_1 \cos(x_1) \end{aligned} \tag{4.10}$$

La función de Lyapunov de tipo racional para este sistema está definida por medio de los siguientes polinomios:

$$\begin{aligned} R_2(\mathbf{x}) &= x_1^2 + 1.3333x_1x_2 + 1.1667x_2^2 \\ R_3(\mathbf{x}) &= -0.2272x_1^3 - 0.1396x_1^2x_2 + 0.3785x_1x_2^2 - 0.1798x_2^3 \\ R_4(\mathbf{x}) &= 0.0136x_1^4 - 0.2864x_1^3x_2 + 0.1918x_1^2x_2^2 - 0.0530x_1x_2^3 + 0.0172x_2^4 \\ Q_1(\mathbf{x}) &= -0.5605x_1 - 0.7255x_2^2 \\ Q_2(\mathbf{x}) &= 0.3254x_1^2 + 0.0910x_1x_2 + 0.1015x_2^2 \end{aligned}$$

Este sistema contiene la función coseno. Dado que el programa BARON no soporta funciones trigonométricas (GAMS, 2008b), se adaptó un procedimiento en dos etapas para estimar el DA del origen como punto de equilibrio asintóticamente estable.

En primer lugar, se efectuó una expansión en series de Taylor para la función coseno y se resolvió el problema (4.8) por medio de BARON, obteniéndose la siguiente solución: $x_1 = 1.2668$, $x_2 = -0.6229$, $c = 1.1762$, $\varepsilon = 0.3528$, que es global para el problema aproximado y se espera que este muy cerca de la solución global del sistema original.

En segundo lugar, para calcular la solución real del problema (4.8), partiendo de un punto inicial correspondiente a la solución aproximada hallada por BARON, se resolvió el sistema original (4.10) empleando el programa de optimización no lineal local CONOPT (GAMS, 2008b), el cual soporta funciones trigonométricas,.

La solución final corresponde al punto $x_1 = 1.3010$, $x_2 = -0.6175$ con $c = 1.2251$ y $\varepsilon = 0.3675$. Los conjuntos de nivel muestran los comportamientos esperados, esto es, contactos tangenciales en las soluciones que a su vez pertenecen a la intersección de las regiones definidas por las restricciones $N(\mathbf{x}) > 0$ y $D(\mathbf{x}) > 0$, como se muestra en la Fig. 4.8.

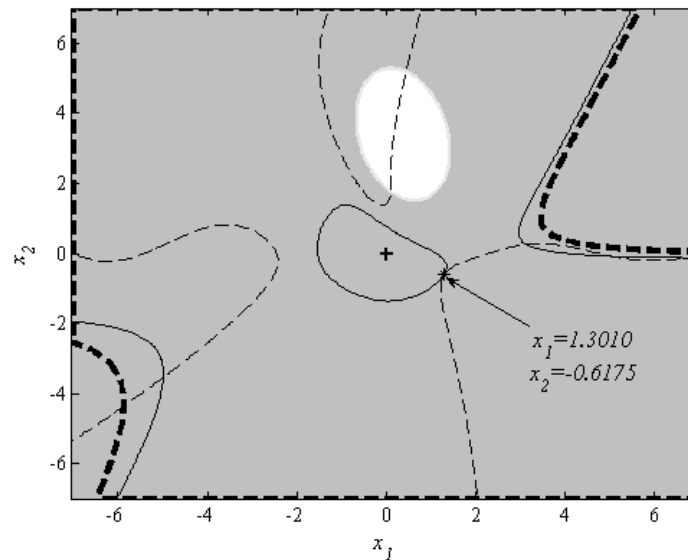


Fig. 4.8: Ejemplo 2. Conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos)

4.4.3 Ejemplo 3: Sistema Polinomial de Tres Estados

Considérese el siguiente sistema de tres estados (Hachicho y Tibken, 2002):

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= -x_1 + x_2 + x_3^2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= -x_2 + x_1x_2 \\ \frac{dx_3}{dt} &= -x_3\end{aligned}\tag{4.11}$$

La función de Lyapunov de tipo racional empleada para este problema contiene los siguientes polinomios:

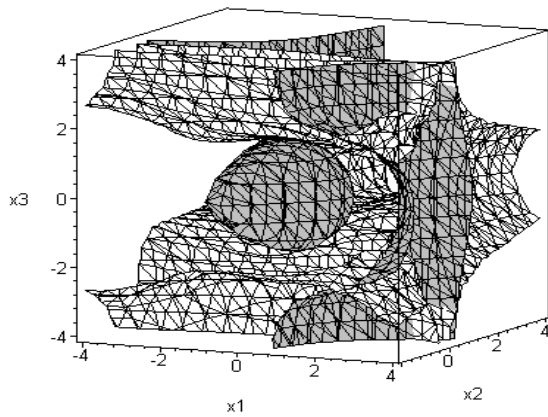
$$\begin{aligned}R_2(\mathbf{x}) &= 0.5x_1^2 + 0.5x_2^2 + 0.5x_3^2 \\ R_3(\mathbf{x}) &= -0.0739x_1^3 + 0.2594x_1x_2^2 - 0.0739x_1x_3^2 \\ R_4(\mathbf{x}) &= -0.0301x_1^4 + 0.0573x_1^2x_2^2 - 0.0301x_1^2x_3^2 + 0.2501x_1x_2x_3^2 - 0.03x_2^4 - 0.03x_2^2x_3^2 \\ Q_1(\mathbf{x}) &= -0.1478x_1 \\ Q_2(\mathbf{x}) &= -0.0602x_1^2 - 0.06x_2^2\end{aligned}$$

La estimación del DA del origen como punto de equilibrio asintóticamente estable de este sistema, se ilustra gráficamente en la Fig. 4.9.

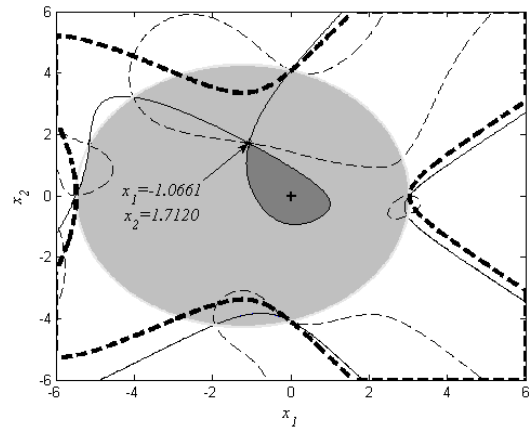
La solución de problema (4.8) corresponde al punto $x_1 = -1.0661$, $x_2 = 1.7120$, $x_3 = -1.3328$, con un valor de $c = 1.3209$ y un valor para la variable auxiliar $\varepsilon = 0$. Cabe notar que el valor de cero para la variable auxiliar ε , significa que el gradiente de $V(\mathbf{x}) - c = 0$ es cero en la solución.

En la Fig. 4.9(a) los conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ se muestran en gris y blanco, respectivamente. La bola sólida alrededor del origen constituye la estimación del DA.

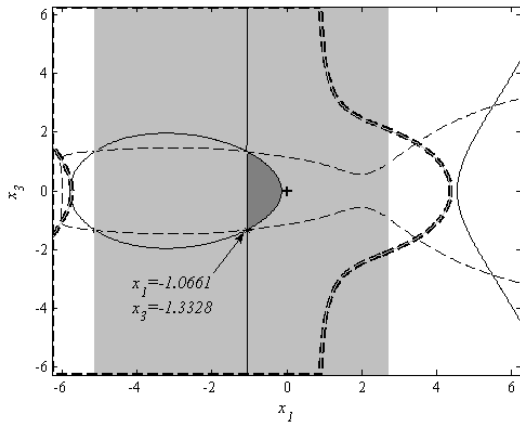
En las Fig. 4.9(b), (c) y (d), se grafican tres vistas diferentes de los conjuntos de nivel junto con las correspondientes restricciones $N(\mathbf{x}) > 0$ y $D(\mathbf{x}) > 0$. Cada vista está parametrizada en el valor solución del estado remanente con el objeto de apreciar que la solución obtenida, efectivamente verifica tangencia y pertenece a la región factible determinada por $N(\mathbf{x}) > 0$ y $D(\mathbf{x}) > 0$. En cada vista, la región correspondiente a la estimación se indica en gris oscuro para facilitar su visualización.



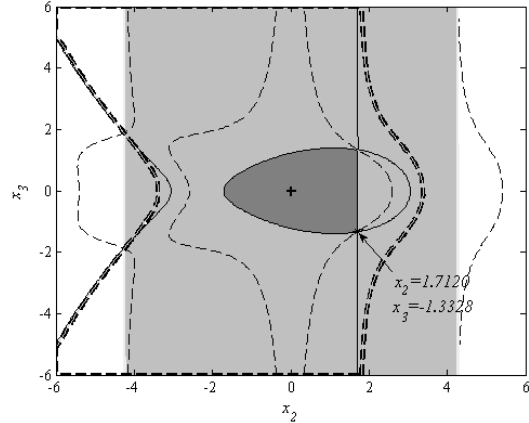
(a) Conjuntos de nivel: $V(\mathbf{x})$ (gris), $dV(\mathbf{x})/dt$ (blanco)



(b) Plano x_1 - x_2 con $x_3 = -1.3328$



(c) Plano x_1 - x_3 con $x_2 = 1.7120$



(d) Plano x_2 - x_3 con $x_1 = -1.0661$

Fig. 4.9: Ejemplo 3. Conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos)

4.4.4 Ejemplo 4: Modelo Epidemiológico

Este ejemplo proveniente de la ingeniería biomédica permite ilustrar el potencial práctico que tiene la determinación de los DA. Se trata de un sistema epidemiológico que modela la propagación de una enfermedad contagiosa. Este modelo es conocido en la literatura como modelo SIR de sus siglas en inglés *Susceptible, Infected, Recovered individuals*.

En primer lugar, se efectúa una descripción cualitativa del modelo y luego se hace uso de la metodología descrita en la sección anterior para calcular una estimación del DA de un punto de equilibrio endémico del sistema.

El modelo SIR se ha utilizado intensamente en el estudio de propagación de enfermedades, dado que describe de manera razonable los comportamientos dinámicos esenciales de las epidemias (Wang y Ruan, 2004). Este modelo está conformado por ecuaciones de balance de individuos de una dada población definidos como susceptibles, infectados y recuperados. Se asume “incidencia horizontal”, lo que implica que los individuos susceptibles se infectan solamente por el contacto con individuos infectados.

La velocidad de incidencia (o de contagio) en su representación más simple, esta modelada por una relación bilineal entre los miembros susceptibles e infectados de la población. Por otra parte, la recuperación de individuos infectados puede deberse a un mecanismo natural o a la implementación de algún tratamiento. Para mitigar la propagación de la enfermedad a través de una estrategia de aislamiento, más conocida como cuarentena, el modelo incluye un término de remoción de individuos infectados.

El modelo SIR se describe usualmente por medio del siguiente sistema de ecuaciones diferenciales no lineales (Wang y Ruan, 2004):

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= A - dS - \lambda SI & \text{a)} \\ \frac{dI}{dt} &= \lambda SI - (d + \gamma)I - r & \text{b)} \end{aligned} \tag{4.12}$$

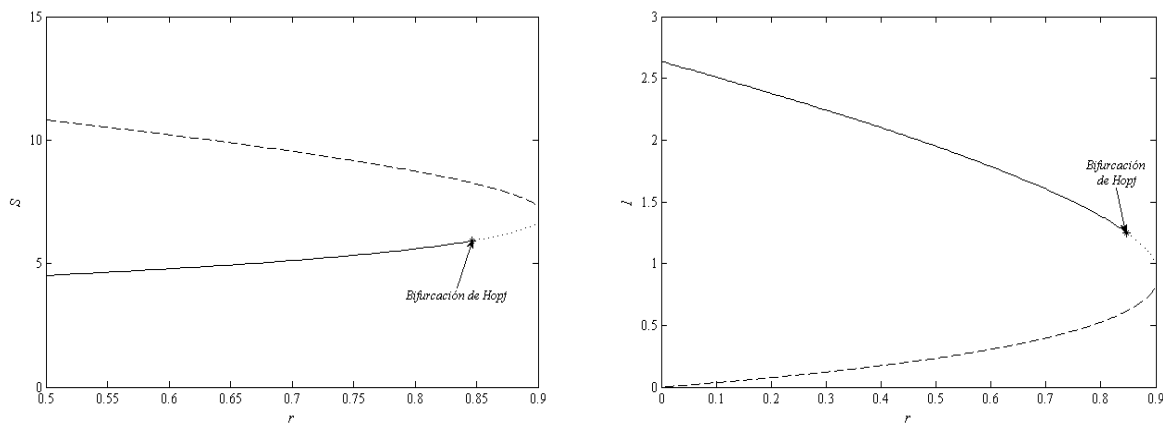
donde S e I representan, respectivamente, la concentración de individuos susceptibles e infectados de una cierta población donde A es la velocidad de reclutamiento de la población, d es la tasa de muerte natural, γ representa la velocidad de recuperación natural de los individuos infectados y λ describe la velocidad de contacto entre los individuos de la población.

El parámetro r representa la capacidad de tratamiento de individuos infectados, y juega un papel importante en el término de velocidad de remoción. Según Wang y Ruan (2004), valores positivos de este término tienen un efecto significativo sobre la dinámica del sistema (4.12), mientras que para $r = 0$ el mismo presenta puntos de equilibrio globalmente estables (libre infección o endemia) (Korobeinikov y Maini, 2005).

Para $r > 0$ coexisten dos estados de equilibrio denominados aquí E_1 y E_2 . A los fines de este estudio se adopta la siguiente parametrización, $A = 4$, $d = 0.3$, $\gamma = 0.8$ y $\lambda = 0.3$

En la Fig. 4.10, se muestran los diagramas de bifurcación para ambos equilibrios con respecto a la variación del parámetro r en el rango $[0; 1]$. El equilibrio E_1 (línea a trazos de la Fig. 4.10) es siempre un nodo silla, puesto que uno de los autovalores de la matriz Jacobiana correspondiente, posee parte real positiva en el intervalo considerado.

El equilibrio E_2 , por otra parte, presenta una bifurcación de nodo estable a inestable (bifurcación de Hopf) cuando el valor de r se incrementa, puesto que, la parte real de ambos autovalores cruza el eje imaginario en $r = 0.8464$ (líneas continua y punteada en Fig. 4.10).



(a) Diagrama de bifurcación en el plano $S - r$ (b) Diagrama de bifurcación en el plano $I - r$

Fig. 4.10: Diagramas de bifurcación para el sistema (4.12)

Para una velocidad de remoción alta ($r = 0.87$), E_2 es inestable y la enfermedad tiende a extinguirse en un tiempo finito, esto significa que el número de individuos infectados tiende a cero cualquiera sea la situación inicial del sistema (Fig. 4.11(a)).

Para velocidades de remoción bajas ($r = 0.6$), el equilibrio E_2 será localmente asintóticamente estable y la situación final de la enfermedad, dependerá del estado inicial de la población, es decir, de la distribución inicial de individuos susceptibles e infectados, (Fig. 4.11(b)).

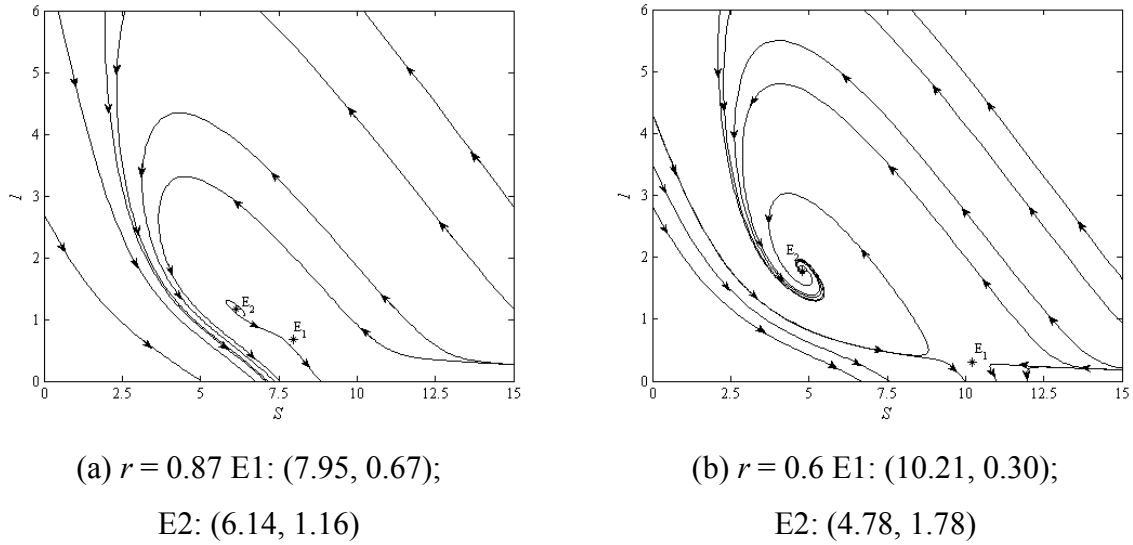


Fig. 4.11: Diagramas de fase para el sistema (4.12)

En otras palabras, desde algunas condiciones iniciales la enfermedad tenderá a extinguirse, mientras que desde otras se alcanzará una situación endémica descrita por un número estable de individuos infectados. Por lo tanto, el equilibrio endémico tiene asociado un dominio de atracción.

Siguiendo la metodología descrita en la Sección 4.3, se procede a la estimación del DA(E2) para el sistema (4.12), con $r = 0.6$ y los valores de los parámetros reportados previamente haciendo uso de una función racional de Lyapunov. Para $n = 4$ y definiendo $\mathbf{x} = [x_1, x_2] = [S + 4.78, I + 1.78]$ la función de Lyapunov de tipo racional está descrita por los siguientes polinomios:

$$R_2(\mathbf{x}) = 1.8276x_1^2 + 3.8341x_1x_2 + 6.6488x_2^2$$

$$R_3(\mathbf{x}) = -0.0309x_1^3 + 0.3806x_1^2x_2 + 0.4899x_1x_2^2 - 0.1068x_2^3$$

$$R_4(\mathbf{x}) = -0.0195x_1^4 - 0.0527x_1^3x_2 - 0.1971x_1^2x_2^2 - 0.1271x_1x_2^3 - 0.1349x_2^4$$

$$Q_1(\mathbf{x}) = 0.1856x_1 + 0.7640x_2$$

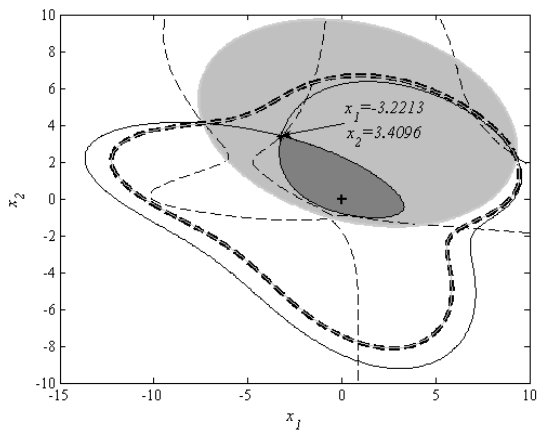
$$Q_2(\mathbf{x}) = -0.0394x_1^2 - 0.0289x_1x_2 - 0.0899x_2^2$$

La solución del problema (4.8) para el sistema (4.12), corresponde al punto $x_1 = -3.2213$, $x_2 = 3.4096$ con un valor de $c = 12.9345$ y un valor para la variable auxiliar $\varepsilon = 0$. Cabe notar,

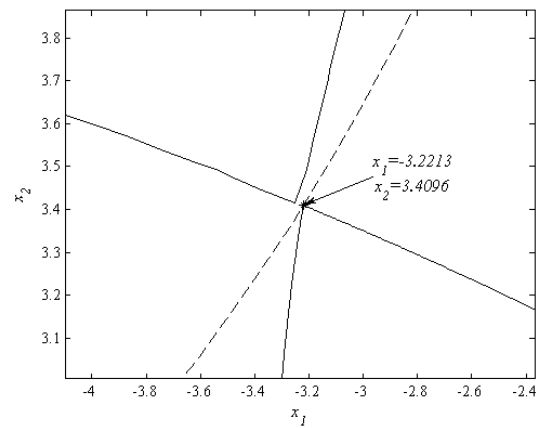
nuevamente, que el valor de cero para la variable auxiliar ε , significa que el gradiente de $V(\mathbf{x}) - c = 0$ es cero en la solución.

En la Fig. 4.12(a), se presentan los conjuntos de nivel y las regiones características para este ejemplo en el espacio de estados $x_1 - x_2$ junto con la estimación del DA en color gris oscuro.

Un detalle de la solución (Fig. 4.12(b)), muestra que la parte interna del conjunto de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ es una región cerrada que estima el DA (línea sólida), mientras su parte externa no toca el conjunto de nivel $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (línea a trazos). Como era de esperarse, la solución pertenece a la intersección de las regiones definida por las restricciones $N(\mathbf{x}) > 0$ (línea a trazos gruesa) y $D(\mathbf{x}) > 0$ (región sombreada en gris claro).



(a) Solución, $c = 12.9345$



(b) Detalle sobre la solución

Fig. 4.12: Ejemplo 4. Conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos)

En la Fig. 4.13, se muestra la estimación del $DA(E_2)$ en el espacio de estados original ($S - I$), junto con el DA real (región blanca). Se puede observar que la estimación se encuentra muy cerca de la frontera del $DA(E_2)$ (manifold estable de E_1) en una porción importante del espacio de estados.

Contar con una estimación de estas características, puede resultar de utilidad para evaluar la posibilidad de una situación endémica dependiendo de la distribución inicial de la población para una cierta capacidad de tratamiento de individuos. Si el sistema parte desde una

condición inicial de individuos infectados y susceptibles perteneciente al interior de la estimación del $DA(E_2)$, este alcanzará un estado endémico en un tiempo finito.

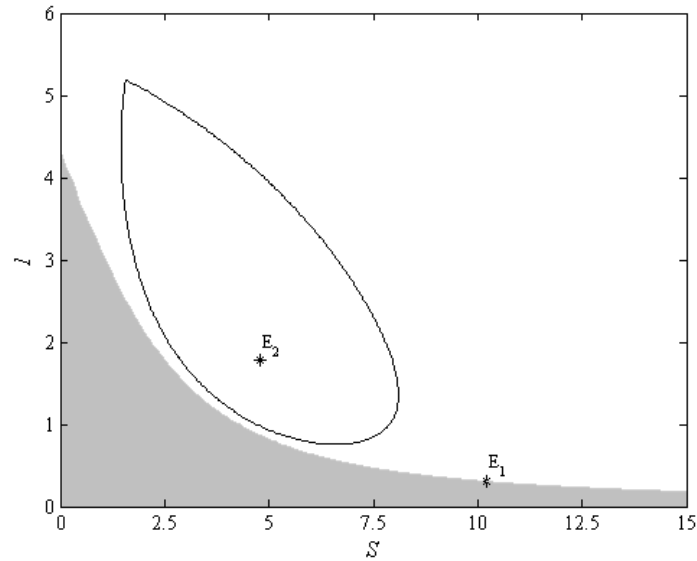


Fig. 4.13: DA y estimación del $DA(E_2)$ para el sistema (4.12)

4.4.5 Ejemplo 5: Modelo de un Reactor de Tanque Agitado Continuo

Este ejemplo consiste en un reactor de tanque agitado continuo en el que tiene lugar una reacción exotérmica de primer orden $A \rightarrow B$ (Fig. 4.14).

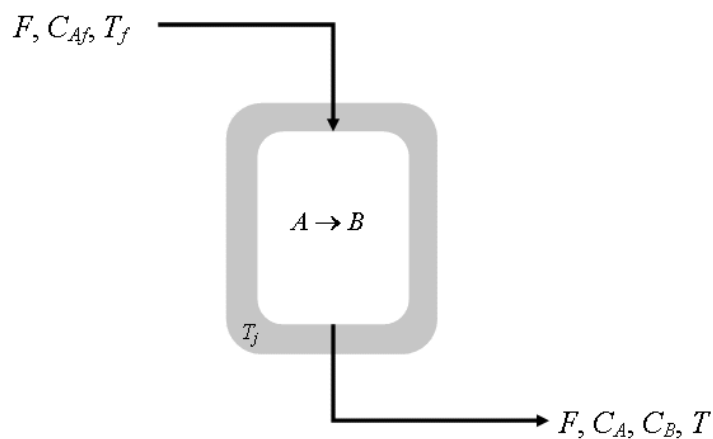


Fig. 4.14: Reactor de Tanque agitado continuo (TAC)

Las ecuaciones de balance de masa y energía (Bequette, 1998) para este sistema son:

$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{dt} &= \frac{F}{V}(C_{Af} - C_A) - k_0 \exp\left(\frac{-\Delta E}{RT}\right)C_A & \text{a)} \\ \frac{dT}{dt} &= \frac{F}{V}(T_f - T) + \left(\frac{-\Delta H}{\rho C_p}\right)k_0 \exp\left(\frac{-\Delta E}{RT}\right)C_A - \frac{UA}{V\rho C_p}(T - T_j) & \text{b)} \end{aligned} \quad (4.13)$$

La Tabla 4.1, presenta las propiedades físicas y los valores de los parámetros para este sistema.

Tabla 4.1: Propiedades físicas y parámetros del sistema (4.13)

Símbolo	Descripción	Valor
k_0	Factor pre-exponencial	9703*3600 h ⁻¹
$-\Delta H$	Calor de reacción	5960 kcal/kgmol
ΔE	Energía de activación	11843 kcal/kgmol
ρC_p	(Densidad)(Capacidad calorífica)	500 kcal/(m ³ °C)
UA/V	(Coeficiente de transferencia de calor)(Área)/(Volumen del Reactor)	150 kcal/(m ³ °C h)
R	Constante de los gases	1.987 kcal/(kgmol K)
F/V	Tiempo de residencia	1 h ⁻¹
C_{Af}	Concentración de A en la alimentación	10 kgmol/m ³
T_f	Temperatura de la alimentación	298 K
T_j	Temperatura del fluido refrigerante	298 K

Para los valores dados en la Tabla 4.1, el sistema posee tres puntos de equilibrio indicados en la Fig. 4.15 a través de las isonulas correspondientes.

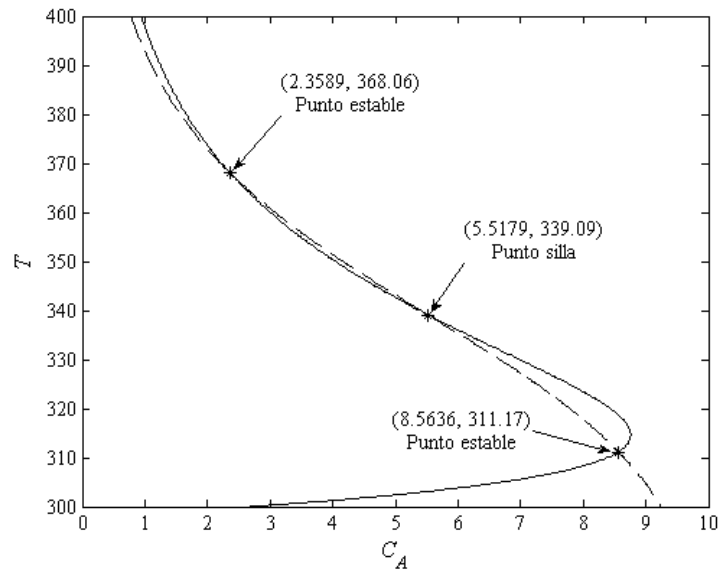


Fig. 4.15: Isonulas y puntos de equilibrio para el sistema (4.13)

Se propone calcular una estimación del dominio de atracción del estado $(2.3589, 368.06)$ que corresponde al punto de equilibrio asintóticamente estable de máxima conversión para este sistema.

A estos fines, se hace uso de una función de Lyapunov de tipo racional con $n = 4$ definida a través de los siguientes términos:

$$R_2(\mathbf{x}) = 325.4977x_1^2 + 71.4479x_1x_2 + 4.2514x_2^2$$

$$R_3(\mathbf{x}) = 69.4087x_1^3 + 22.9472x_1^2x_2 + 2.1447x_1x_2^2 + 0.0404x_2^3$$

$$R_4(\mathbf{x}) = 1.7325x_1^4 + 0.7648x_1^3x_2 + 0.0591x_1^2x_2^2 + 0.0008x_1x_2^3 + 0.0005x_2^4$$

$$Q_1(\mathbf{x}) = 0.7341x_1 + 0.0809x_2$$

$$Q_2(\mathbf{x}) = 0.0877x_1^2 + 0.0195x_1x_2 + 0.0007x_2^2$$

donde $\mathbf{x} = [x_1, x_2] = [C_A + 2.3589, T + 368.06]$.

La solución del problema (4.8) para el sistema (4.13), corresponde al punto $x_1 = 4.7561$, $x_2 = -33.8799$ con un valor de $c = 639.5575$ y un valor para la variable auxiliar $\varepsilon = 0.4745$. La Fig. 4.16(a), ilustra los conjuntos de nivel y las regiones de interés para este ejemplo junto con la solución óptima de este problema.

En este ejemplo en particular, se puede ver que la región $D(\mathbf{x}) > 0$ esta separada en dos zonas en la porción analizada del espacio de estados (región gris). La restricción $N(\mathbf{x}) > 0$ (línea gruesa a trazos) excluye la parte inferior izquierda y reduce la región factible del problema a la parte superior derecha de $D(\mathbf{x}) > 0$ donde pertenece la solución.

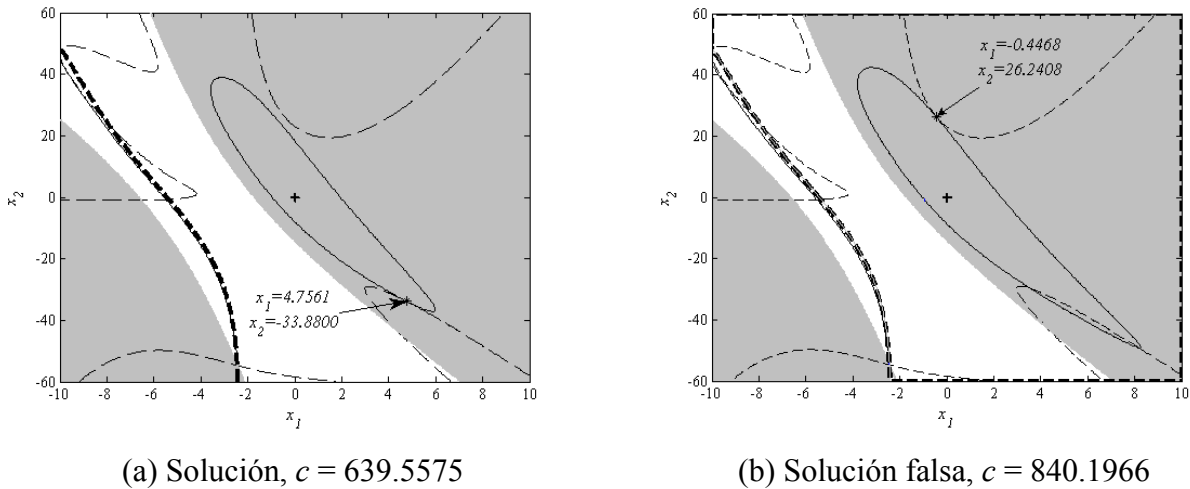


Fig. 4.16: Ejemplo 5. Conjunto de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ (sólida) y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$ (trazos)

Puede observarse también la existencia de una solución falsa cercana a la solución verdadera, como se ilustra en la Fig. 4.16(b). El requerimiento de optimalidad global impide la convergencia a esta solución falsa del DA.

En la Fig. 4.17, se muestra la estimación del DA para el punto de máxima conversión en el espacio de estados original ($C_A - T$), junto con el DA real (región blanca). Se puede observar que la estimación se encuentra muy cerca de la frontera del DA real (“manifold” estable del punto de silla) en una porción importante del espacio de estados. Este tipo de información es útil para evaluar si el sistema retornará a la condición de máxima conversión cuando es afectado por una perturbación externa (por ejemplo, un pulso en la temperatura de alimentación, T_f).

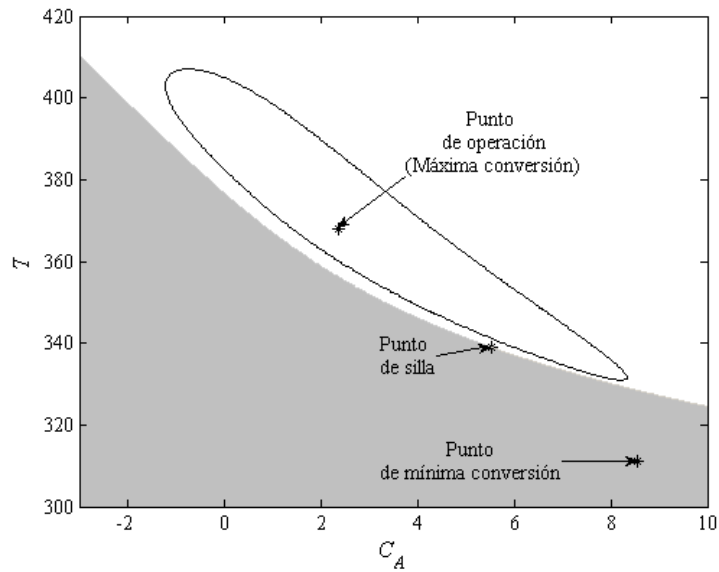


Fig. 4.17: DA y estimación del DA del punto de máxima conversión para el sistema (4.13)

4.5 Consideraciones Finales

En este capítulo se propuso una nueva formulación matemática para la estimación de dominios de atracción de puntos de equilibrio asintóticamente estables. La misma se basa en funciones de Lyapunov de tipo racional y métodos de optimización global

Las principales contribuciones respecto a enfoques previos, corresponden a la inclusión de las siguientes condiciones adicionales en la formulación del problema de optimización:

Restricción de tangencia para evitar intersecciones transversales (soluciones falsas) entre los conjuntos de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ y $dV(\mathbf{x})/dt = 0$.

Restricciones sobre las funciones $N(\mathbf{x})$ y $D(\mathbf{x})$ que reducen la región factible y evitan la convergencia a soluciones falsas existentes, mas allá de las regiones donde tienen lugar cambios de signo en la definición de las funciones $V(\mathbf{x})$ y $dV(\mathbf{x})/dt$.

Optimalidad global para asegurar que la solución este contenida dentro de la región de definición negativa de $dV(\mathbf{x})/dt$, mediante el empleo de un método de optimización global de tipo branch and bound (GAMS/BARON) en el caso de los ejemplos presentados.

La importancia de eliminar los diferentes tipos de soluciones falsas con el uso de las condiciones 1-3, fue demostrada a través de varios ejemplos. El empleo de GAMS/BARON permite el tratamiento de sistemas no lineales de tipo general, superando las limitaciones de otros enfoques, restringidos a sistemas dinámicos polinomiales.

Cabe mencionar que la metodología propuesta puede ser empleada haciendo uso de otros tipos de funciones de Lyapunov. La restricción de tangencia debe mantenerse en cualquier caso, así como la condición de optimalidad global por las razones ilustradas a lo largo del capítulo. Sin embargo, las restricciones para evitar soluciones más allá de la transición de signo de $V(\mathbf{x})$ y de su derivada temporal no son universales y deberán estudiarse en cada caso específico.

CAPÍTULO 5

DISEÑO DE SISTEMAS DINÁMICOS NO LINEALES BASADO EN LA OPTIMIZACIÓN DE LOS DOMINIOS DE ATRACCIÓN

5.1 Introducción

En este capítulo se propone una nueva metodología para el diseño del punto de operación de un sistema dinámico no lineal, basado en la optimización de una medida de la extensión de su dominio de atracción.

La metodología propuesta implementa una estrategia de optimización en dos niveles. En el nivel interior se resuelve un problema de optimización global para obtener una estimación apropiada de DA para cada posible realización de las variables de diseño. En el nivel exterior se manipulan dichas variables de diseño por medio de un algoritmo de optimización estocástico. Esto último es para superar los inconvenientes de no diferenciabilidad introducidos por el hecho que un problema de optimización en un nivel interior actúe como restricción de otro problema en un nivel exterior.

La metodología desarrollada se aplica a varios ejemplos para ilustrar los diferentes aspectos de la formulación.

5.2 Consideraciones Preliminares para una Nueva Formulación de Diseño

En esta sección se discutirán aspectos generales concernientes a la formulación del problema de diseño propuesto. Específicamente se introducirán conceptos relacionados con la optimización de autovalores y con los problemas de optimización en dos niveles. También se desarrollará el problema de cálculo de estimaciones de DA basado en funciones cuadráticas de Lyapunov.

Optimización de Autovalores

Como se mencionó en el Capítulo 3, existe una dificultad de índole práctica para obtener expresiones matemáticas para los autovalores de matrices de un tamaño superior a 4 por 4 (Kokossis y Floudas, 1994). Incluso en los casos en los que se pueden obtener expresiones analíticas, su frecuente no convexidad y potencial no diferenciabilidad, hace que estos problemas resulten difíciles de resolver para algunos algoritmos de optimización NLP estándar.

Una dificultad crítica en el problema de optimización de autovalores es su potencial coalescencia (Overton, 1992). Los autovalores de una matriz cuyos elementos son diferenciables respecto a las variables de optimización pueden resultar no diferenciables en los puntos donde ocurre la coalescencia. Además, es también frecuente, que la propia forma de la función objetivo del problema de optimización tienda a hacer coalescer los autovalores a medida que se aproxima a la solución del problema. El siguiente ejemplo ilustra esta característica (Overton, 1992). Considere la matriz:

$$\mathbf{A}(\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 1 + y_1 & y_2 \\ y_2 & 1 - y_1 \end{bmatrix}$$

cuyos autovalores son:

$$1 \pm \sqrt{y_1^2 + y_2^2}$$

Se puede ver que el menor autovalor se maximiza cuando $y_1 = y_2 = 0$. Claramente, la función mínimo autovalor no es suave en este punto óptimo, tal como se muestra en la Fig. 5.1. De modo que para afrontar estas dificultades de no diferenciabilidad cuando hay autovalores involucrados en un problema de optimización, es necesario emplear métodos de optimización especializados (Blanco, 2003).

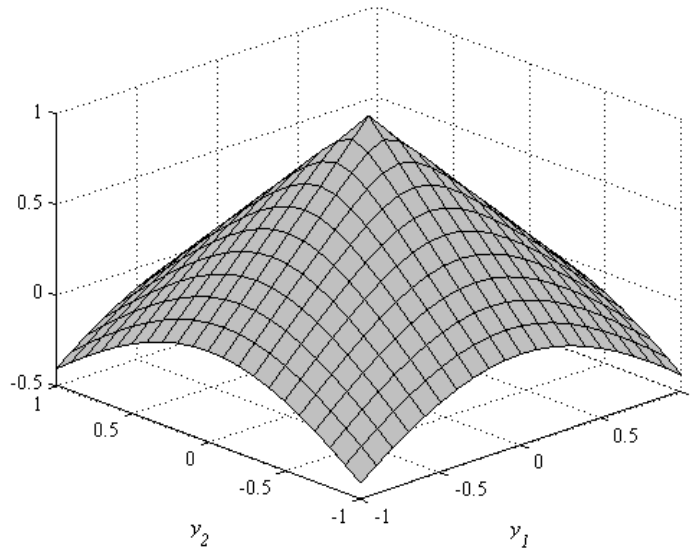


Fig. 5.1: No diferenciabilidad del mínimo autovalor del ejemplo de Overton

Estimación de DA Basadas en Funciones de Lyapunov Cuadráticas

En el Capítulo 4, se formuló el problema de estimación del DA como un problema de optimización cuyo objetivo es determinar el mayor conjunto de nivel $V(\mathbf{x}) = c$ contenido dentro de la región de definición negativa de $dV(\mathbf{x})/dt$. El problema se planteó utilizando funciones Lyapunov del tipo racional (Vannelli y Vidyasagar, 1985) y se formularon una serie de condiciones para converger a una estimación apropiada.

Las mismas ideas pueden extenderse para utilizar los resultados del Teorema 2.6, planteando el siguiente problema de optimización:

$$\begin{aligned}
 & \min_{r, \mathbf{x}, \mathbf{P}, \mathbf{Q}} \quad r \\
 \text{s.a.} \quad & \|\mathbf{x}\| - r = 0 \quad \text{a)} \\
 & \mathbf{A}(\mathbf{x})^T \mathbf{P} + \mathbf{P} \mathbf{A}(\mathbf{x}) = -\mathbf{Q} \quad \text{b)} \\
 & \frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{Q})}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0 \quad \text{c)} \\
 & r > 0
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

La solución deseada del problema (5.1) es un único punto en el espacio de estados, el cual corresponde al contacto de la bola B_r de radio r y a la superficie $\frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{Q})}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0$.

El fundamento teórico detrás de la formulación del problema (5.1), es que dentro de la bola B_r siempre es posible inscribir un conjunto invariante elíptico el cual constituye una estimación del DA de acuerdo con lo discutido en el Capítulo 2. Cabe notar, que el problema (5.1) es un problema de optimización no lineal y por consiguiente puede tener múltiples soluciones locales.

Con el objetivo de evitar este tipo de soluciones que resultan inadecuadas para la correcta estimación del DA, el problema (5.1) debe ser resuelto a optimalidad global. Esta situación es análoga a la planteada en el problema (4.7) del capítulo anterior, empleando funciones racionales de Lyapunov.

Las condiciones de tangencia y de transición de signos (condiciones 1 y 2 del problema (4.7)) no son necesarias en este caso, puesto que, el conjunto de nivel dado por la bola B_r está bien condicionado. En otras palabras, la bola B_r está definida como la superficie de una función cuadrática y por lo tanto es monótonamente creciente en el espacio de estados (5.1a). Por ende, la condición de optimalidad global es suficiente para garantizar la convergencia a una estimación apropiada del DA.

Al igual que en el capítulo anterior, la condición de optimalidad global del problema (5.1) se asegura mediante el empleo de programas de optimización global, como por ejemplo BARON (GAMS, 2008b).

Para ilustrar la solución del problema (5.1), considérese el oscilador de *Van der Pol* (Ec. 5.2):

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= x_1 - x_2 + x_1^2 x_2 \end{aligned} \tag{5.2}$$

Se adopta la matriz identidad como la matriz \mathbf{Q} en (5.1b). Este sistema solo contiene un punto de equilibrio asintóticamente estable que corresponde al origen de coordenadas. En la Tabla 5.1 se presentan los autovalores de la matriz Jacobiana evaluada en el origen de coordenadas.

La Fig. 5.2 muestra las isonulas del sistema (5.2) (líneas punteadas), junto con la la bola B_r (línea sólida) y la superficie $\frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{1}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0$ (línea a trazos). El círculo pequeño indica el punto de intersección entre los conjuntos de nivel de interés.

Tabla 5.1. Datos y resultados para el ejemplo (Ec. 5.2)

x_{1s}	$\lambda_1(\mathbf{A})$	x_1	$\lambda_1(\mathbf{P})$	r
x_{2s}	$\lambda_2(\mathbf{A})$	x_2	$\lambda_2(\mathbf{P})$	
0.0	$-0.5000 + 0.8660i$	0.6919	0.6910	0.8474
0.0	$-0.5000 + 0.8660i$	0.4892	1.8090	

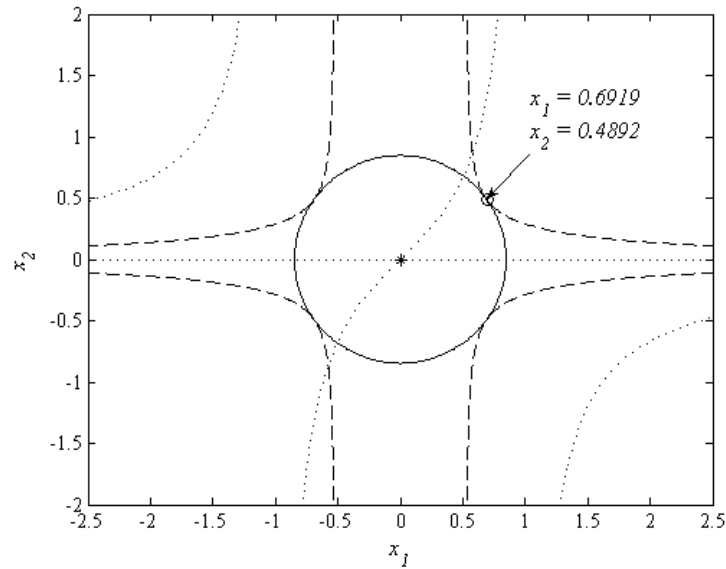


Fig. 5.2: Resultados para le sistema (5.2). Bola B_r (sólida), Restricción 5.1(c) (Trazos)

Como se describió en el Capítulo 2, las estimaciones obtenidas utilizando esta metodología constituyen aproximaciones conservadoras de los dominios de atracción reales, especialmente si se los compara con los correspondientes a la funciones de Lyapunov de tipo racional.

Sin embargo, el tamaño de la bola B_r tiene un efecto indirecto sobre el tamaño del DA real, lo que permite formular una metodología para optimizar su extensión sin las complejidades asociadas a funciones de Lyapunov más sofisticadas.

Como se verá más adelante, el incremento de radio de la bola B_r posee un “efecto de empuje” sobre la frontera del DA real, conformado habitualmente por los manifold estables de equilibrios silla y por ciclos límite.

Consecuentemente, el radio r de la bola B_r es un candidato adecuado para ser utilizado como función de mérito en el problema de diseño de sistemas. El problema de diseño será considerado como el nivel externo de un problema de optimización en dos niveles, como será expuesto posteriormente. A continuación se describirán brevemente algunas de las características de los problemas de optimización en dos niveles y su aplicación en el problema propuesto.

Optimización en Dos Niveles

La formulación general de un problema de optimización en dos niveles es como sigue:

$$\begin{aligned}
 & \min_{\mathbf{x} \in X, \mathbf{y} \in Y} F(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\
 \text{s.a. } & H(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \\
 & G(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 0 \\
 & \min_{\mathbf{y} \in Y} f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\
 \text{s.a. } & h(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 0 \\
 & g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 0
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

Este problema constituye, en definitiva, un problema de optimización en un nivel exterior, restringido por otro problema de optimización en un nivel interior.

La optimización en dos niveles es una disciplina muy desafiante y se han propuesto diversos enfoques para abordar su resolución (Dominguez y Pistikopoulos, 2009). Una metodología clásica consiste en formular las condiciones de optimalidad de Karush – Kuhn – Tucker (KKT) del problema interior y adicionarlas como un conjunto de restricciones algebraicas no lineales al modelo del problema externo. Sin embargo, las condiciones de KKT se verifican en todos los puntos estacionarios del problema de optimización interior, es decir, en todos sus mínimos y máximos locales y puntos de ensilladura (Reklaitis y col., 1983). Por lo tanto, no es directo identificar la solución global entre todas las posibles soluciones del sistema de KKT del problema interior.

Para ilustrar estos conceptos se considera el siguiente problema sencillo de optimización en dos niveles:

$$\begin{aligned}
 & \min_{x,y} z \\
 \text{s.a. } & z = f(x) = x^4 - 16x^3 + 83.75x^2 - 162.5x + 93.75 \\
 & x \leq x^* \\
 & x^* = \min_y x \\
 \text{s.a. } & x = f(y) = 0.5y^4 - 12y^3 + 101.875y^2 - 356.25y + 461.875
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

Se requiere que la solución del problema interior cumpla con condiciones de optimalidad global.

El problema interior posee dos soluciones (Fig. 5.3(a)): $(y_1^* = 3.438; x_1^* = 3.449)$ y $(y_2^* = 8.377; x_2^* = 14.578)$. Si se planteara el problema (5.4) adicionando las condiciones de KKT del problema interior, la solución a este problema correspondería al punto $z_2^* = -33.102$ con un valor de $x = 6.562$ que es el mínimo global de la función $z = f(\mathbf{x})$ (Fig. 5.3(b)). Sin embargo, esta solución no corresponde al óptimo global del problema interior (Fig. 5.3(a)).

La solución deseada del problema (5.4) corresponde al punto $z_1^* = -10.844$ con un valor de $x = 1.623$ que es el óptimo global del problema interior (Fig. 5.3(b)).

El ejemplo anterior demuestra que la inclusión de las condiciones de KKT del problema interior al modelo del problema exterior, no asegura la optimalidad global de éste último aunque se resuelva a optimalidad global.

Alternativamente, si el problema interior es lo suficientemente simple, un enfoque intuitivo para resolver el problema en dos niveles es obtener expresiones analíticas de sus soluciones parametrizadas en las variables de diseño e incluirla como restricciones en el problema exterior.

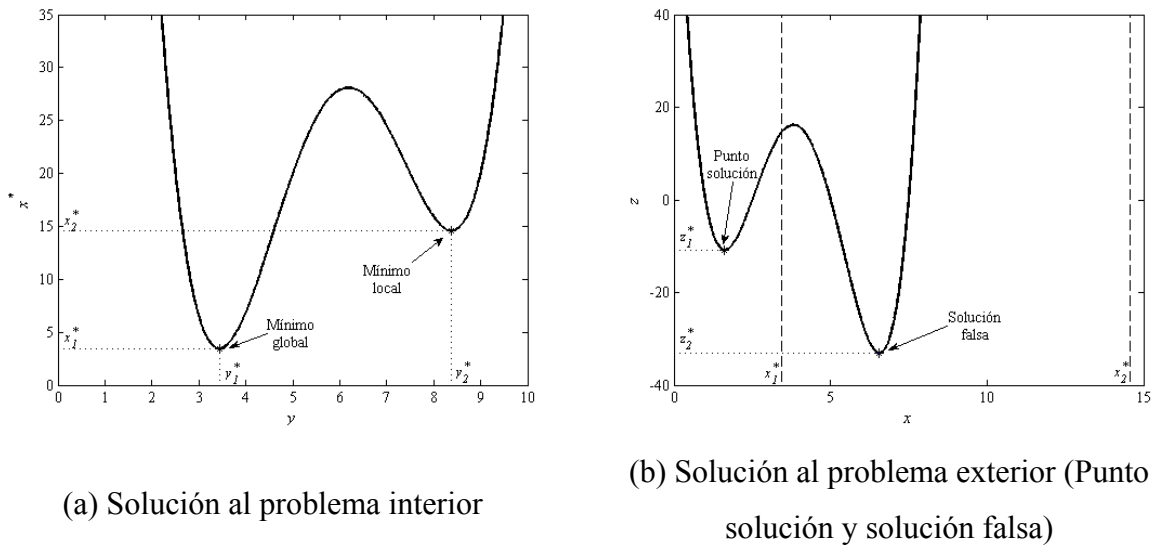


Fig. 5.3: Solución al problema (5.4)

Sin embargo, puede suceder que la solución global del problema interno no resulte diferenciable en los parámetros de diseño. Para ilustrar esto, considérese el siguiente problema de optimización de nivel interior, (Ec. 5.5):

$$\begin{aligned} & \max_{d,x} x^2 \\ \text{s.a. } & x^2 - dx - 1 = 0 \end{aligned} \tag{5.5}$$

donde d es la variable de diseño del problema exterior y x la variable de optimización del problema interior. La solución global parametrizada de este problema es;

$$\max \left\{ \left(\frac{d + \sqrt{d^2 + 4}}{2} \right)^2, \left(\frac{d - \sqrt{d^2 + 4}}{2} \right)^2 \right\}. \text{ Ambas ramas de la solución se grafican en la Fig.}$$

5.4. La solución del problema (5.5) son las partes superiores de cada rama. Es claro que la solución es no diferenciable en $d = 0$.

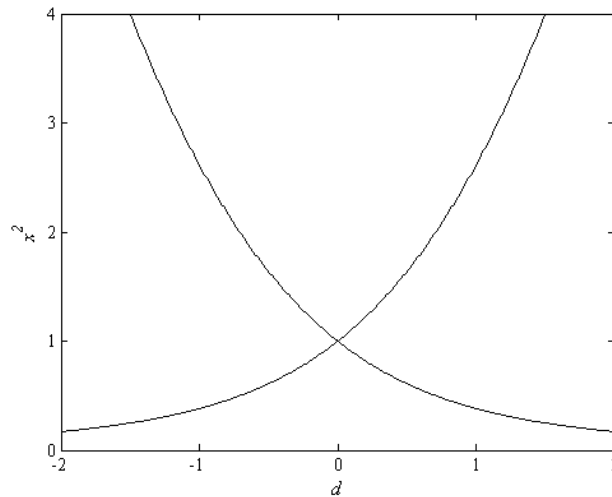


Fig. 5.4: Ramas de la solución del problema (5.5)

5.3 Nueva Formulación de Diseño de Sistemas no Lineales

Como se ha discutido anteriormente, en general el DA de un punto de equilibrio asintóticamente estable de un sistema dinámico no lineal es un conjunto de forma compleja y posiblemente de extensión infinita que usualmente no admite representaciones analíticas.

Las estimaciones del DA basadas en funciones de Lyapunov de tipo cuadrático son siempre hiper-elipses en el espacio de estados. En virtud del Teorema 2.6, se sabe que es posible inscribir elipses que constituyen estimaciones del DA dentro de la bola B_r definida previamente. Además, como se mencionó en la sección anterior, la maximización del radio de este conjunto de nivel, maximizará indirectamente a su vez la extensión del DA real del punto de equilibrio de interés.

Basado en las consideraciones anteriores, se propone el principal resultado de este capítulo consistente en una nueva formulación para plantear el problema de diseño de sistemas dinámicos no lineales, con el objetivo de optimizar una medida de la extensión del DA de su punto de equilibrio operativo:

$$\begin{aligned}
 & \max_{r, \mathbf{x}_s, \mathbf{d}} r \\
 \text{s.a. } & \mathbf{f}(\mathbf{x}_s, \mathbf{d}) = 0 \quad \text{a)} \\
 & \operatorname{Re}\{\lambda_i[\mathbf{A}(\mathbf{x}_s, \mathbf{d})]\} < 0 \quad i = 1, \dots, n \quad \text{b)} \\
 & \left\{ \begin{array}{l} \min_{r, \mathbf{x}, \mathbf{P}, \mathbf{Q}} r \\ \text{s.a. } \|\mathbf{x}\| - r = 0 \\ \mathbf{A}(\mathbf{x}_s)^T \mathbf{P} + \mathbf{P} \mathbf{A}(\mathbf{x}_s) = -\mathbf{Q} \\ \frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{Q})}{\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0 \\ r > 0 \end{array} \right. \quad \text{c)} \\
 & \mathbf{d}^L \leq \mathbf{d} \leq \mathbf{d}^U \\
 & \mathbf{x}_s^L \leq \mathbf{x}_s \leq \mathbf{x}_s^U
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

Esta formulación matemática es un problema de optimización no lineal en dos niveles, como los discutidos anteriormente. La ecuación (5.6a) representa el sistema dinámico evaluado en la condición de estado estacionario, donde \mathbf{x}_s es el punto de equilibrio y \mathbf{d} es el vector de variables diseño.

La restricción (5.6b) corresponde a la condición de estabilidad asintótica del punto de equilibrio \mathbf{x}_s , mediante la imposición de que la parte real de los autovalores de la matriz Jacobiana $\mathbf{A}(\mathbf{x}_s, \mathbf{d})$ sea estrictamente negativa (Teorema 2.1).

La restricción (5.6c) representa el problema de cálculo del radio de la bola B_r . Cabe aclarar que, sin pérdida de generalidad, con el objeto de resolver el sub-problema de optimización (5.6c), cada punto de equilibrio $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_s$ se traslada al origen del espacio de estados.

En el problema exterior de la formulación en dos niveles, la función objetivo a maximizar es el radio de la bola B_r , es decir, la distancia entre el equilibrio estable \mathbf{x}_s y el punto en el espacio de estados \mathbf{x} , donde se intersecan la superficie de la bola B_r y la superficie definida

$$\text{por } \frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{Q})}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0.$$

Como se mencionó anteriormente, los autovalores de una matriz no poseen, en general, expresiones analíticas para ser incluidas directamente en el modelo de optimización. Por otra parte, la restricción sobre los autovalores introduce no diferenciableidad debido a posibles efectos de coalescencia. Adicionalmente, la restricción (5.6c) es un problema de optimización

que debe ser resuelto a optimalidad global, puesto que soluciones locales no resultan apropiadas.

Para superar los inconvenientes introducidos por la no diferenciabilidad de las restricciones (5.6b) y (5.6c), se propone el empleo de una estrategia de optimización estocástica sobre la base de la programación evolutiva, para explorar el espacio de las variables de diseño en el nivel exterior. Este tipo de métodos se basa en la evolución de una población de soluciones de acuerdo a un conjunto de reglas. Para cada individuo de la población de variables de diseño, se calcula un punto de equilibrio \mathbf{x}_s a partir de la Ec. (5.6a) y se verifica su factibilidad con respecto a la restricción (5.6b).

Si el equilibrio es asintóticamente estable, se resuelve entonces el problema (5.6c) en el nivel interior para calcular el radio de la bola B_r , el cual retornará como valor de la función objetivo. Un algoritmo determinístico del tipo branch and bound se adopta en este paso.

El siguiente pseudo-código resume el procedimiento y la Fig. 5.5 esquematiza el algoritmo de solución.

Paso 1: Generar una población inicial para las variables de diseño \mathbf{d} .

Paso 2: Para cada miembro de la población calcular el equilibrio \mathbf{x}_s .

Paso 3: Evaluar la función de mérito r , como se propone a continuación:

- a. Si \mathbf{x}_s no existe entonces asignar $r = 0$.
- b. Si \mathbf{x}_s existe entonces evaluar los autovalores de la matriz Jacobiana $\mathbf{A}(\mathbf{x}_s, \mathbf{d})$.
 - i. Si la parte real de alguno de los autovalores es positiva, entonces asignar $r = 0$.
 - ii. Si la parte real de todos los autovalores es negativa, entonces resolver el problema (5.6c) para evaluar el radio r .

Paso 4: Chequear el criterio de terminación.

- a. Si el criterio de terminación no se verifica entonces generar una nueva población basada en el valor de la función objetivo de los individuos y retornar al paso 2.
- b. Si el criterio de terminación se verifica, entonces terminar.

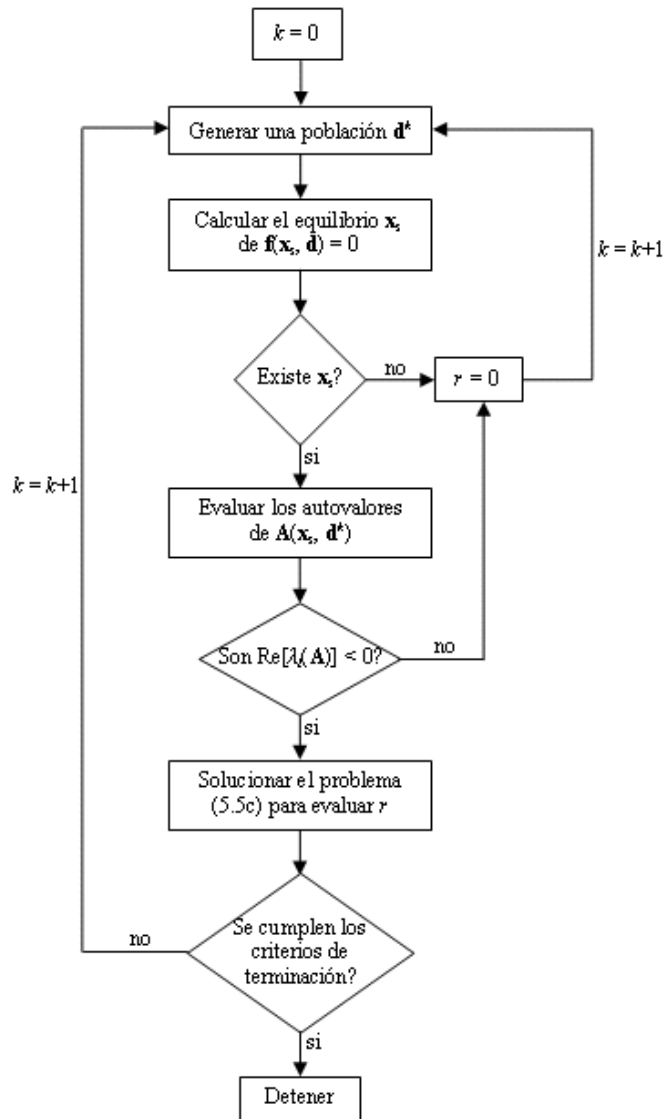


Fig. 5.5: Algoritmo de solución para la formulación (5.6)

Si no existen puntos de equilibrio o si son inestables, entonces el DA no existe y sus radios tienen un valor de cero (paso 3a y 3b i). Si existen puntos de equilibrios estables, sus funciones de mérito asumen los valores de los respectivos radios (paso 3b ii)). De esta manera, los individuos correspondientes a puntos de equilibrio estables con valores de radio grandes son favorecidos en esta búsqueda.

Existen varias técnicas de programación evolutiva muy bien desarrolladas para optimización no lineal y no lineal mezcla entera tales como los algoritmos genéticos (Michalewicz, 1996),

evolución diferencial (Storn y Price, 1997) y optimización por enjambre (Kennedy y col., 2001). Una discusión de los beneficios y desventajas de las diferentes técnicas esta fuera del alcance de esta tesis. En general, con un ajuste apropiado de los parámetros, dichos algoritmos se comportan adecuadamente en la exploración de espacios no restringidos complejos, los cuales pueden ser multimodales y discontinuos. Para la formulación propuesta se adoptó una implementación estándar de algoritmos genéticos (MATLAB, 2010a).

Una vez que se genera la población de individuos en el espacio de variables de diseño, la función de mérito (radio de la bola B_r) debe ser calculada para cada miembro de la población.

El primer paso, es evaluar el punto de equilibrio correspondiente por medio de la solución de la restricción (5.6a). Puesto que (5.6a) es un sistema de ecuaciones no lineales, puede ocurrir alguna de las siguientes situaciones para una cierta realización del vector \mathbf{d} :

- i.* No existen puntos de equilibrios.
- ii.* Solo existe un punto de equilibrio.
- iii.* Existen dos o más puntos de equilibrio (multiplicidad de estados estacionarios).

Por consiguiente, el paso 2 del pseudo-código requiere del cálculo de todas las soluciones de un sistema algebraico de ecuaciones no lineales.

Si no existen puntos de equilibrio o solo existe uno, la evaluación de la función de mérito se implementa de acuerdo al paso.

Si existen dos o más puntos de equilibrio pueden darse diversas situaciones. Puede ocurrir, por ejemplo, que una de las soluciones sea un punto de equilibrio promisorio estable con un valor grande de radio de bola B_r ($\mathbf{d}, \mathbf{x}_s^1$), mientras que el otro corresponda a una solución inestable ($\mathbf{d}, \mathbf{x}_s^2$). Con el fin resolver esta situación es necesario diseñar un mecanismo para preservar el buen candidato ($\mathbf{d}, \mathbf{x}_s^1$) y evitar el individuo menos promisorio ($\mathbf{d}, \mathbf{x}_s^2$). A continuación se describe el enfoque propuesto para resolver esta situación.

En el paso 2 del procedimiento, se utiliza un algoritmo estándar del tipo Newton-Raphson para resolver el sistema (5.6a). Esta clase de algoritmo requiere un punto de partida, \mathbf{x}_0 , para inicializar la búsqueda. La solución obtenida, es por lo tanto, altamente dependiente de esta inicialización.

Con el fin de evitar la necesidad de determinar todas las raíces para un dado \mathbf{d} y mantener contabilizados los individuos más promisorios, el vector de variables de diseño \mathbf{d} se extiende para incluir el vector de inicialización \mathbf{x}_0 . Por lo tanto, el espacio ampliado $[\mathbf{d}, \mathbf{x}_0]$ es explorado en el nivel exterior por medio del algoritmo estocástico. De esta manera, la información sobre los puntos de equilibrio se considera simultáneamente en la búsqueda junto con el vector de variables de diseño a través del componente \mathbf{x}_0 .

El algoritmo descrito en la Fig. 5.5 se implementó en el programa MATLAB, con la asistencia de GAMS para el problema interno. La rutina *gatool*, proporciona la población inicial de variables $[\mathbf{d}, \mathbf{x}_0]$. Para cada individuo de la población, se resuelve la Ec. (5.6a) para calcular el punto de equilibrio correspondiente empleando la rutina *fsolve* que implementa un algoritmo Newton-Raphson. Para cada estado de equilibrio, se evalúan los autovalores del Jacobiano empleando la función *eig(A)*. Si todos los autovalores poseen parte real negativa, se resuelve en GAMS/BARON el problema interno de cálculo del radio de la bola. El valor de radio para cada individuo $[\mathbf{d}, \mathbf{x}_0]$ se retorna a la función *gatool* para generar una nueva población. Para detalles de las rutinas *gatool* y *fsolve*, ver (MATLAB, 2010a y 2010b), respectivamente.

Además, se debe mencionar que el signo estrictamente negativo y positivo de las restricciones (5.6b) y (5.6c), se imponen a través de una constante ε a la cual se asigna valor positivo pequeño ($\text{Re}[\lambda_i(\mathbf{A})] \leq -\varepsilon$ y $r \geq \varepsilon$, donde $\varepsilon \approx 0.0001$).

El criterio de terminación empleado en la implementación del procedimiento iterativo propuesto, es el número máximo de generaciones permitido para la evolución de la población.

5.4 Ejemplos de Aplicación de la Nueva Formulación

En esta sección se desarrollan un número de ejemplos con el fin de ilustrar los diferentes aspectos de la formulación propuesta. En todos los casos se seleccionó la matriz identidad \mathbf{I} como la matriz \mathbf{Q} en el problema (5.6).

5.4.1 Ejemplo 1: Sistema Polinomial de dos estados

Considere el sistema dado por al Ec. (5.7) el cual es una versión modificada del presentado en Hachicho (2007):

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= -x_1 + x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= bx_1 - 2x_2 - x_1^2 + x_1^3\end{aligned}\tag{5.7}$$

Para los propósitos de este estudio, se considera el parámetro b como la variable de diseño que puede variar dentro del rango $[0.1, 2.5]$. El punto de equilibrio analizado es el origen de coordenadas $(0, 0)$ el cual es estable dentro de todo el rango de la variable de diseño b . La solución óptima se comparará con un caso base donde se fija arbitrariamente un valor $b = 1$, para dicha variable de diseño.

Para el caso base, se calcula el radio de la bola B_r resolviendo el problema (5.1). Los datos y resultados se muestran en la Tabla 5.2.

En la Fig. 5.6(a) se muestran las isonulas (líneas punteadas) para el sistema (5.7) junto con la bola B_r (línea sólida) y el conjunto de nivel $\frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{1}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0$ (línea a trazos). El círculo pequeño indica la intersección entre los conjuntos de nivel de interés.

Se identifican tres puntos de equilibrio, el origen (estable) y dos puntos de ensilladura cuyos manifolds estables conforman de la frontera del DA del origen.

Para el caso óptimo, se permite la variación de la variable b dentro de su rango por medio de la resolución del problema (5.6). Los resultados se muestran en la Tabla 5.2 y en la Fig. 5.6 (b). Se puede observar que el radio de la bola en el caso óptimo es mayor que para el caso base de acuerdo a lo esperado.

Tabla 5.2. Datos y resultados para el Ejemplo 1

Caso	b	x_{1s}	$\lambda_1(\mathbf{A})$	x_1	$\lambda_1(\mathbf{P})$	r	δ
		x_{2s}	$\lambda_2(\mathbf{A})$	x_2	$\lambda_2(\mathbf{P})$		
Base	1.0	0.0	-0.3820	-0.2950	0.1910	0.2950	0.8740
		0.0	-2.6180	0.0	1.3090		
Óptimo	0.1	0.0	-0.9084	-0.5188	0.2260	0.5188	1.3665
		0.0	-2.0916	0.0	0.6345		

También es posible comprobar que el DA real (región blanca) en el caso óptimo, es mayor que el correspondiente al caso base. En este ejemplo en particular, las fronteras del DA son los manifolds estables de los puntos de ensilladura. Es evidente de la comparación de ambas regiones, que la consecuencia de maximizar el radio de B_r produce un “efecto de empuje” sobre los puntos de ensilladura y por lo tanto sobre las fronteras del DA real.

Con el fin de proporcionar una medida cuantitativa del aumento efectivo del DA se define el parámetro δ , el cual, para este problema específico, representa la distancia entre el punto de equilibrio de interés y el punto de ensilladura más cercano. Se puede observar que esta medida se incrementa en un 56.35% debido al efecto de la optimización con respecto al caso base (Tabla 5.2).

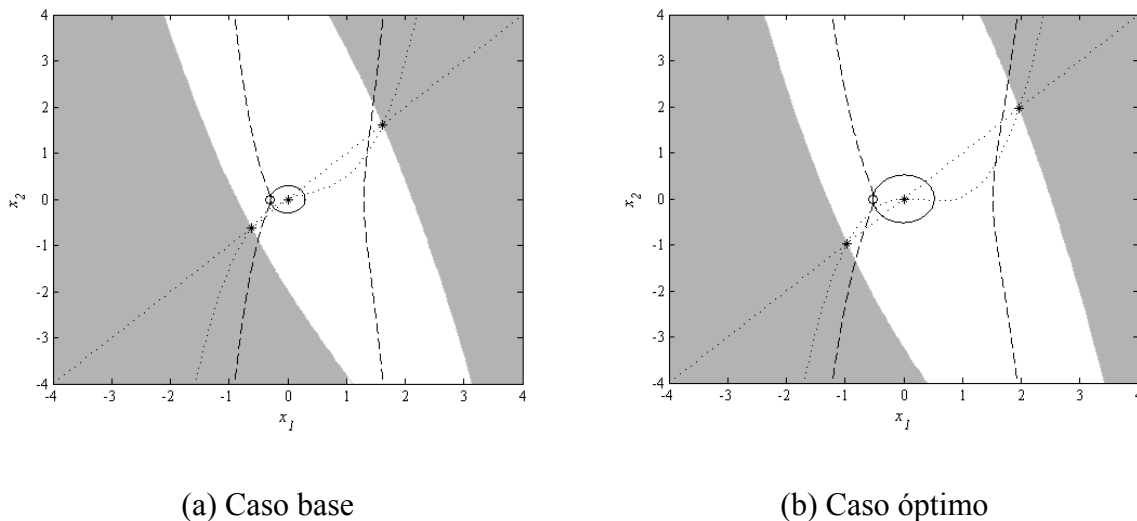


Fig. 5.6: Resultados para el Ejemplo 1.
Bola B_r (sólida), restricción (5.6c) (trazos)

5.4.2 Ejemplo 2: Sistema Polinomial de dos Estados

Considere el siguiente sistema reportado en Wang y Ruan (2004):

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -0.84x_1 - 1.44x_2 - bx_1x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= 0.54x_1 + 0.34x_2 + bx_1x_2 \end{aligned} \tag{5.8}$$

El parámetro b se emplea como variable de diseño y se le permite variar dentro del rango $[0.1, 0.9]$. El equilibrio analizado es el origen de coordenadas $(0, 0)$, el cual permanece estable dentro de todo el rango de la variable b . Para propósitos de comparación, la solución óptima se analiza contra un caso base donde se fija arbitrariamente el valor $b = 0.3$.

Los datos y resultados de este ejemplo se muestran en la Tabla 5.3. En la Fig. 5.7(a) se grafican las isonulas (líneas punteadas) junto con la bola B_r (línea sólida) y el conjunto de nivel $\frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{1}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0$ (línea a trazos) para el caso base. El círculo pequeño indica la intersección entre los conjuntos de nivel de interés.

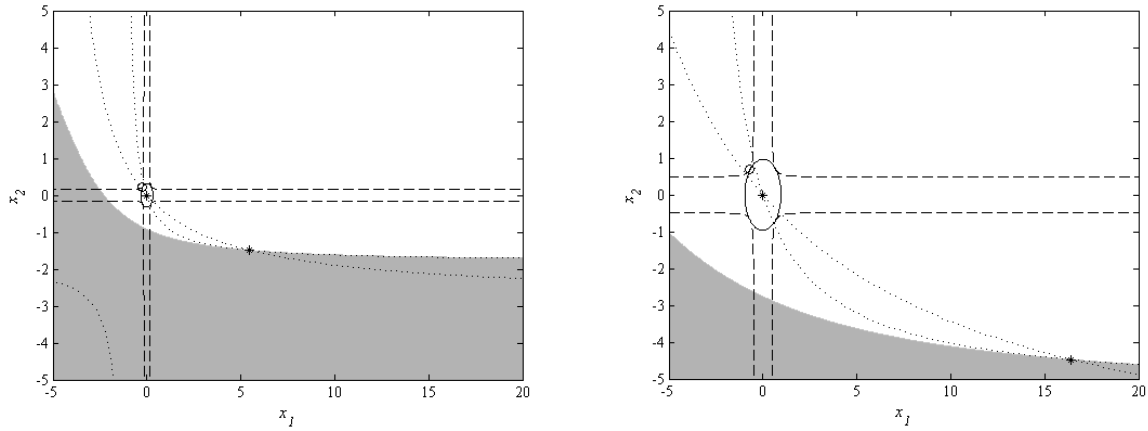
En este ejemplo, se identifican solo dos puntos de equilibrio, el origen, que como se dijo anteriormente es estable y un punto de ensilladura cuyo manifold estable delimita el DA del origen.

Tabla 5.3. Datos y resultados para el Ejemplo 2

Caso	b	x_{1s}	$\lambda_1(\mathbf{A})$	x_1	$\lambda_1(\mathbf{P})$	r	δ
		x_{2s}	$\lambda_2(\mathbf{A})$	x_2	$\lambda_2(\mathbf{P})$		
Base	0.3	0.0	$-0.2500 + 0.6554i$	-0.2277	1.1583	0.3221	5.6663
		0.0	$-0.2500 + 0.6554i$	0.2277	7.3181		
Óptimo	0.1	0.0	$-0.2500 + 0.6554i$	-0.6832	1.1583	0.9662	16.9990
		0.0	$-0.2500 + 0.6554i$	0.6832	7.3181		

Los resultados de la optimización se muestran en la Tabla 5.3 y en la Fig. 5.7(b). Como era de esperarse, se puede observar que el radio de la bola en el caso óptimo es mayor que para el caso base. El aumento del DA se debe, como en el ejemplo anterior, al “efecto de empuje”

sobre el punto de ensilladura y por lo tanto, sobre su manifold estable el cual constituye una frontera del DA.



(a) Caso base

(b) Caso óptimo

Fig. 5.7: Resultados para el Ejemplo 2.

Bola B_r (sólida), Restricción (5.6c) (Trazos)

Para propósitos de comparación, se define nuevamente el parámetro δ como la distancia entre el punto de equilibrio de interés y el punto de ensilladura (Tabla 5.3). Se puede ver que esta medida se incrementa en un 200 % como consecuencia de la optimización para este ejemplo.

5.4.3 Ejemplo 3: Oscilador de *Van der Pol*

En este tercer ejemplo, la metodología propuesta se aplica al oscilador de *Van der Pol* tomado de Tan (2006):

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= x_1 - x_2 + (1 - 0.2b)x_1^2 x_2 \end{aligned} \tag{5.9}$$

El parámetro b es la variable de diseño que puede variar dentro del rango $[-1, 1]$. El punto de equilibrio bajo estudio es el origen (único punto de equilibrio del sistema), el cual es estable dentro de todo el rango de la variable b . El DA de este punto está delimitado por un ciclo límite inestable.

Para los propósitos de este estudio, la solución óptima será comparada con un caso base donde la variable de diseño se fija arbitrariamente en un valor de cero ($b = 0$).

La Tabla 5.4 y la Fig. 5.8(a) muestran los datos y resultados para el caso base. Las isonulas del sistema (líneas punteadas), demuestran la existencia de un único punto de equilibrio. Como en los ejemplos previos, se muestra la bola B_r en línea sólida y el conjunto de nivel $\frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{1}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0$ en línea a trazos. El círculo pequeño indica el punto intersección entre las superficies de interés.

Los resultados de la optimización se muestran en la Tabla 5.4 y en la Fig. 5.8(b). Se puede observar que el radio de la bola B_r para el caso óptimo, es mayor que el correspondiente al caso base como también lo es el DA real resultante (región blanca).

Tabla 5.4. Datos y resultados para el Ejemplo 3

Caso	b	x_{1s}	$\lambda_1(\mathbf{A})$	x_1	$\lambda_1(\mathbf{P})$	r	δ
		x_{2s}	$\lambda_2(\mathbf{A})$	x_2	$\lambda_2(\mathbf{P})$		
Base	0	0.0	$-0.5000 + 0.8660i$	0.6919	0.6910	0.8474	1.5402
		0.0	$-0.5000 + 0.8660i$	0.4892	1.8090		
Óptimo	1	0.0	$-0.5000 + 0.8660i$	-0.7736	0.6910	0.9474	1.7029
		0.0	$-0.5000 + 0.8660i$	-0.5470	1.8090		

Para propósitos de comparación ambos DA reales dados por los casos base y óptimo se ilustran en la Fig. 5.9. A partir de este ejemplo puede concluirse que, el efecto de la optimización del radio de la bola tiene un “efecto de empuje” sobre el ciclo límite que constituye la frontera del DA del origen para el sistema (5.9).

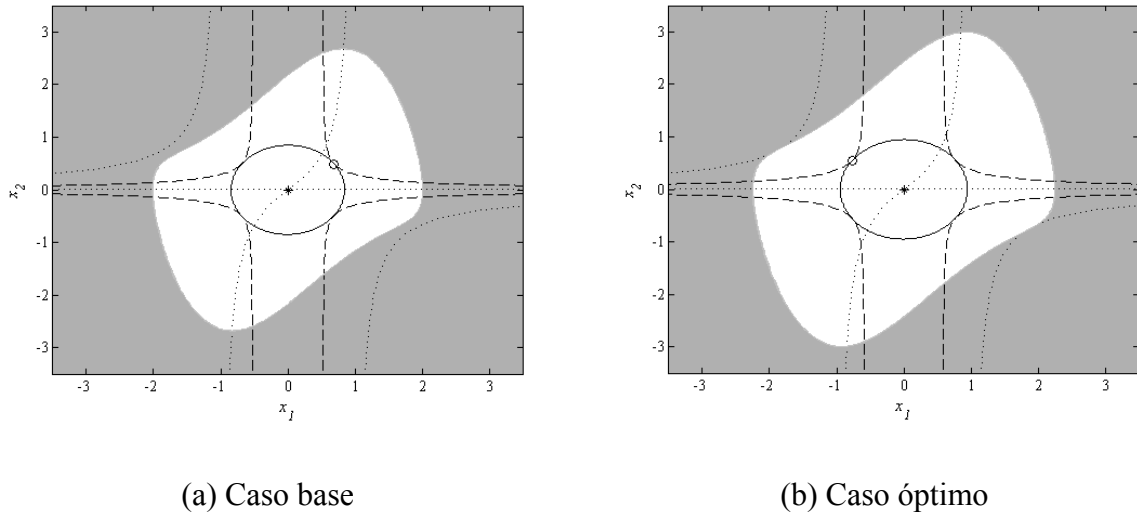


Fig. 5.8: Resultados para el Ejemplo 3.
 Bola B_r (sólida), Restricción (5.6c) (Trazos)

Con el fin de cuantificar la mejora, el parámetro δ se define en este caso, como el radio de la mayor bola que puede ser inscrita dentro del ciclo límite (Tabla 5.4). Tal medida se incrementó en un 10.56 % debido al efecto de la optimización.

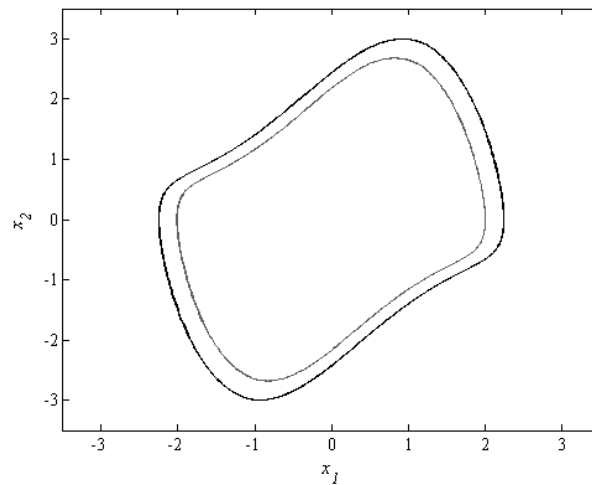


Fig. 5.9: Ciclos límites para el Ejemplo 3.
 Caso Base (línea gris) y caso óptimo (línea negra)

5.4.4 Ejemplo 4: Sistema no polinomial de Dos Estados

Considere el siguiente sistema, el cual es una versión modificada del presentado en Chiang y col. (1995).

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= x_2 - bx_1 \\ \frac{dx_2}{dt} &= x_2 - 2\text{sen}(x_1) + 1\end{aligned}\tag{5.10}$$

A diferencia de los ejemplos previos, en este ejemplo la topología puede verse modificada con la variación de la variable de diseño. En otras palabras, el cambio del valor de la variable de diseño puede provocar la aparición, desaparición y cambio de posición de puntos de equilibrio, así como de su caracterización respecto de la estabilidad. El parámetro b se fija inicialmente en un valor de cero (Tabla 5.5). El punto de equilibrio asintóticamente estable analizado es $(0.5236, 0)$. En la Fig. 5.10(a) se muestra el equilibrio estable rodeado por dos puntos de ensilladura cuyos manifolds estables delimitan el DA del punto estable (intersección de las líneas punteadas).

Como en los ejemplos previos, la línea sólida representa la bola B_r y la línea a trazos el conjunto de nivel $\frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{1}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0$.

En un segundo caso se resolvió el problema (5.6) permitiendo variar el parámetro b dentro del rango $[0, 1.5]$. La solución óptima corresponde a un valor de $b = 1.5$ (Tabla 5.5). La topología del sistema es la misma que en el caso previo ya que se preservan los dos puntos de ensilladura, aunque se manifestó un leve cambio de posición de los tres puntos de equilibrio de interés (Fig. 5.10(b)).

El “efecto de empuje” sobre los puntos de ensilladura produce un aumento efectivo del DA del punto equilibrio estable. Nuevamente, se define el parámetro δ como la distancia entre el punto de equilibrio estable de interés y el punto de ensilladura más cercano. Esta medida se incrementa en un 10.13 % debido al efecto de la optimización con respecto a el primer caso, (Tabla 5.5).

Finalmente, se considera un tercer caso donde la variable b puede variar dentro del rango $[0, 2.5]$. La solución óptima corresponde a un valor del parámetro $b = 2.5$ (Tabla 5.5). En este

caso, la topología del sistema cambia puesto que solo dos puntos de equilibrio permanecen en el espacio de estados, el asintóticamente estable y un punto de ensilladura.

El DA tiene un tamaño mayor que en los dos casos anteriores debido a una manifestación más intensa del “efecto de empuje” (Fig. 5.10(c)). Debido al efecto de la optimización, el parámetro δ se incrementó en un 18.85 % con respecto al primer caso y en un 7.91 % con respecto al segundo caso (Tabla 5.5).

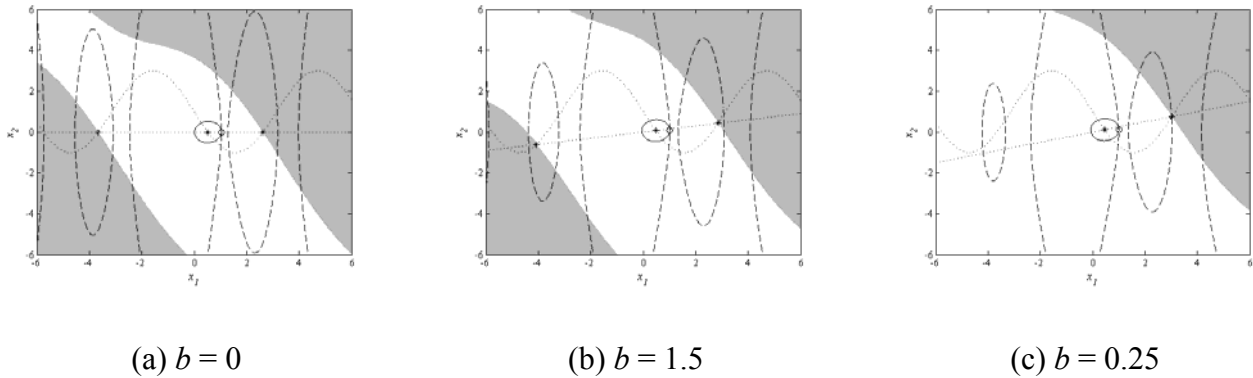


Fig. 5.10: Resultados para el Ejemplo 4. Bola B_r (sólida), Restricción (5.6c) (Trazos)

Tabla 5.5. Datos y resultados para el Ejemplo 4

b	x_{1s} x_{2s}	$\lambda_1(\mathbf{A})$ $\lambda_2(\mathbf{A})$	x_1 x_2	$\lambda_1(\mathbf{P})$ $\lambda_2(\mathbf{P})$	r	δ
0	0.5236 0.0000	$-0.5000 + 1.2174i$ $-0.5000 - 1.2174i$	1.0364 0.0000	0.7013 1.7421	0.5128	2.6180
0.15	0.4823 0.0723	$-0.5750 + 1.2614i$ $-0.5750 - 1.2614i$	1.0134 0.0769	0.6289 1.4084	0.5311	2.8833
0.25	0.4586 0.1146	$-0.6250 + 1.2856i$ $-0.6250 - 1.2856i$	0.9977 0.1230	0.5896 1.2437	0.5391	3.1115

5.5 Consideraciones Finales

En este capítulo se propuso un enfoque de diseño donde simultáneamente se asegura estabilidad asintótica y un dominio de atracción óptimo del punto de equilibrio resultante. Específicamente, la función de mérito propuesta a ser maximizada es el radio de una bola en el espacio de estados dentro de la cual es posible asegurar la definición negativa de la derivada temporal de una función de Lyapunov de tipo cuadrático. Dentro de esta bola, es posible inscribir un conjunto elíptico invariante que constituye una estimación del DA. Si

bien estas estimaciones son habitualmente conservadoras, el “efecto de empuje” resultante de la optimización del tamaño de la bola B_r , tiene el efecto deseado sobre la extensión del DA como se mostró en los ejemplos presentados.

CAPÍTULO 6

CASOS DE ESTUDIO

6.1 Introducción

En este capítulo se emplea la metodología propuesta en el capítulo anterior, para el diseño de un controlador realimentado de un fermentador y para el diseño a lazo cerrado de un sistema acoplado reactor – separador – reciclado (RSR).

En el caso del fermentador el objetivo es obtener una estrategia de control sencilla para mejorar la robustez del sistema frente a posibles perturbaciones. Se comparan los resultados a lazo abierto y a lazo cerrado para un escenario donde una perturbación de cierta magnitud altera las condiciones de equilibrio.

Para el sistema RSR se comparan los resultados obtenidos por medio de la metodología de diseño propuesta en esta tesis con los correspondientes a una estrategia de diseño clásica, consistente en la optimización de una función objetivo económica con restricciones de estabilidad asintótica sobre las soluciones de estado estacionario del sistema.

6.2 Antecedentes de los Casos de Estudio

Debido a su destacada importancia en ingeniería química y bioquímica, los sistemas reaccionantes han sido muy estudiados en las últimas décadas desde el punto de vista de su comportamiento dinámico no lineal. Por ejemplo, se han publicado muchos estudios sobre reactores de tanque agitado continuo y tubulares, con el objetivo de investigar su comportamiento dinámico desde la estabilidad asintótica hasta el comportamiento caótico.

En particular, los bio-procesos son una clase de sistema reaccionantes que han adquirido gran importancia debido a su proyección tecnológica. Un ejemplo es la producción de etanol por

vía fermentativa (bio-etanol), el cual es empleado en gran escala en algunos países como fuente renovable de energía en reemplazo de los combustibles fósiles.

El desempeño de un bio-proceso depende fundamentalmente de la etapa de fermentación, la cual debe ser operada con variaciones mínimas de las condiciones de estado estacionario para evitar impactos significativos en el resto del proceso.

En Jarzebski (1992) se describe el comportamiento oscilatorio en un proceso de fermentación continua para la obtención de etanol. Szederkényi y col. (2002) comparan diferentes tipos de controladores no lineales para un bioreactor continuo cerca del punto de productividad óptima. Garhyan y col. (2003) estudian el comportamiento dinámico oscilatorio y caótico de un proceso de fermentación anaeróbica y Garhyan y Elnashaie (2004) incorporan al modelo anterior una membrana para mejorar la selectividad del proceso.

Por otra parte, los sistemas RSR también han recibido mucha atención por parte de la comunidad de ingeniería de procesos debido a su importancia tecnológica y desafiante comportamiento no lineal, tanto a lazo abierto como bajo control. Se pueden citar por ejemplo los trabajos de Luyben y Luyben (1997), Pushpavanam y Kienle (2001), Zeyer y col. (2006) y Vetukuri y col. (2006). En ellos se hace uso de simulación dinámica y de las teorías de singularidad y bifurcación para analizar las diferentes configuraciones de control encontradas usualmente en la industria.

El sistema RSR estudiado en los trabajos anteriores, está constituido por un reactor tanque agitado continuo (TAC), seguido por una etapa de separación de fases (flash). La corriente rica en reactivos separada en el flash se recicla a la etapa de reacción para mejorar la conversión global del proceso. Cada unidad individual tiene un comportamiento dinámico propio. El reactor aislado, puede llegar a mostrar multiplicidad de estados estacionarios en condiciones no isotérmicas (Fogler, 2006). La unidad de separación, en cambio, no presenta en forma aislada este tipo de multiplicidades.

Si bien la estimación de dominios de atracción de reactores aislados ha motivado varias contribuciones (Berger y Perlmutter, 1964 y 1965; Pellegrini y col. 1988), de acuerdo a nuestro conocimiento, no se han reportado trabajos en los que se analice en forma sistemática el DA de procesos de fermentación y de sistemas RSR.

6.3 Caso I: Sistema de Fermentación

Con el fin de estudiar el desempeño a lazo abierto y bajo control de un fermentador continuo, se considera el siguiente modelo (Szederkényi y col., 2002):

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= \mu(S)X - \frac{XF}{V_f} & \text{a)} \\ \frac{dS}{dt} &= -\frac{\mu(S)X}{Y} + \frac{(S_f - S)F}{V_f} & \text{b)} \end{aligned} \tag{6.1}$$

donde,

$$\mu(S) = \mu_{\max} \frac{S}{K_2 S^2 + S + K_1} \tag{6.2}$$

Los estados y parámetros del modelo se proporcionan en la Tabla 6.1. La Ec. (6.1a) corresponde al balance de biomasa y la Ec. (6.1b) al de sustrato. Ambos balances están acoplados por la función de crecimiento (6.2), la cual es la principal fuente de no linealidad e incertidumbre de este modelo.

Tabla 6.1. Variables y parámetros del modelo del proceso de fermentación (6.1)-(6.2)

Variable/Parámetro	Descripción	Valor	Unidades
X	Concentración de biomasa (estado estable)	4.8907	[g/l]
S	Concentración de sustrato (estado estable)	0.2187	[g/l]
F	Caudal en la alimentación	3.2089	[l/h]
V_f	Volumen	4	[l]
S_f	Concentración de sustrato en la alimentación	10	[g/l]
Y	Coefficiente de rendimiento	0.5	[-]
μ_{\max}	Máxima velocidad de crecimiento	1	[l/h]
K_1	Parámetro de saturación	0.03	[g/l]
K_2	Parámetro de inhibición	0.5	[l/g]

Aunque el punto de operación de este sistema es estable, el mismo se encuentra muy próximo a un punto de ensilladura ubicado en $X = 4.8627$, $S = 0.2744$, cuyo manifold estable delimita su DA (Fig. 6.1(a)). Puede observarse que aunque la región de estabilidad es infinita (región

blanca de la Fig. 6.1(a)), el equilibrio está muy próximo a la frontera de su DA y por lo tanto pequeñas perturbaciones en ciertas direcciones pueden sacarlo de este.

Por la razón anterior, se propone mejorar las características dinámicas de este sistema por medio de la aplicación de una estrategia sencilla de control proporcional realimentado sobre ambos estados del sistema. El caudal de alimentación F se manipula de acuerdo a la siguiente expresión:

$$F = k_X(X - X_{ss}) + k_S(S - S_{ss}) + F_{sp} \quad (6.3)$$

Se permite a las constantes del control proporcional k_X y k_S variar dentro del rango $[-0.35, 0]$. El objetivo es determinar una combinación óptima $k_X - k_S$, tal que el dominio de atracción del punto de operación del sistema a lazo cerrado sea mayor que el correspondiente a lazo abierto.

Para el caso del sistema operando a lazo abierto (Ecs. (6.1) y (6.2)), se efectúa el cálculo del radio de la bola B_r resolviendo el problema (5.1). Estos resultados se reportan en la Tabla 6.2. En la Fig. 6.1(a) se muestran las isonulas del sistema (líneas punteadas) y la correspondiente bola B_r (línea sólida) junto con el conjunto de nivel dado por $\frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{1}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0$ (línea a trazos).

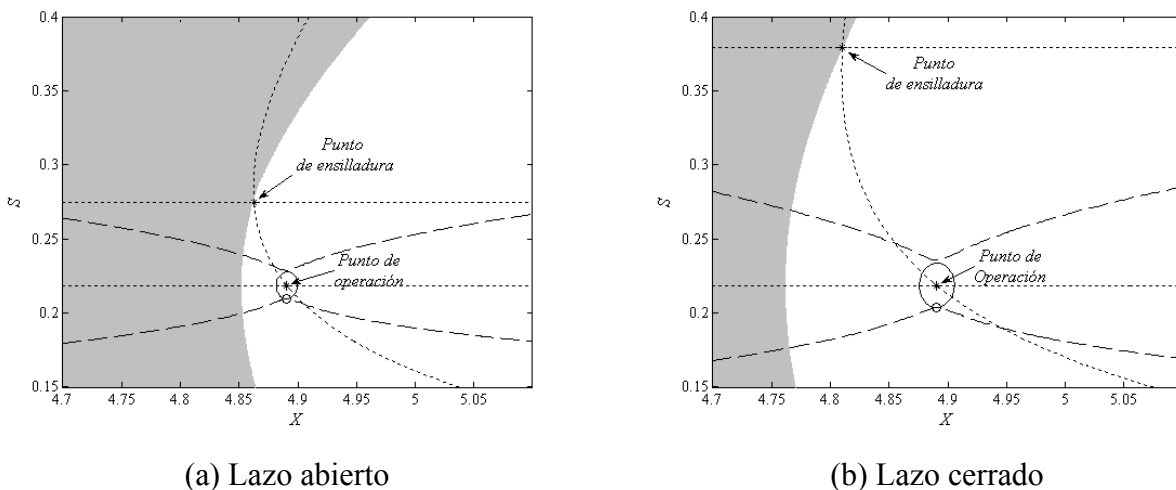


Fig. 6.1: Resultados para el sistema de fermentación.
Bola B_r (línea sólida), Restricción (5.6c) (línea a trazos)

Para el sistema operando a lazo cerrado (Ecs. (6.1)-(6.3)), se resuelve el problema (5.6) para determinar los parámetros de la ley de control que maximizan, indirectamente, el dominio de atracción del punto de operación. Los resultados se reportan en la Tabla 6.2.

En la Fig. 6.1(b) se muestran las isonulas (líneas punteadas) y la correspondiente bola B_r (línea sólida) junto con el conjunto de nivel $\frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{1}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0$ (línea a trazos). Se puede observar que el punto de ensilladura y su “manifold” estable están más alejados que en el sistema a lazo abierto, debido al “efecto de empuje” resultante del incremento del tamaño de la bola B_r .

Para los dos casos considerados, al igual que en los ejemplos reportados en el capítulo anterior, se define un parámetro δ para cuantificar el incremento de tamaño del DA, como la distancia entre el punto de equilibrio y el punto de ensilladura. Se observa una mejora del 468.42 % en la magnitud de esta métrica como consecuencia de la optimización (Tabla 6.2).

Tabla 6.2. Datos y resultados para el sistema de fermentación

Caso	k_X	X_s	$\lambda_1(\mathbf{A})$	S	$\lambda_1(\mathbf{P})$	r	δ
	k_S	S_s	$\lambda_2(\mathbf{A})$	X	$\lambda_2(\mathbf{P})$		
Lazo abierto	0	4.9807	-0.8022	4.9807	0.3497	9.112×10^{-3}	0.0624
	0	0.2187	-0.8034	0.2278	2.8405		
Lazo cerrado	0	4.9807	-0.8022	4.9807	0.2329	0.0149	0.3547
	-0.35	0.2187	-1.6580	0.2038	1.5968		

Para ilustrar el comportamiento dinámico de este sistema, se considera el siguiente escenario. En un tiempo $t = t_0$, la concentración de sustrato en la corriente de alimentación se incrementa en un 5%. Frente a esta perturbación, el sistema evoluciona hacia un nuevo punto de operación. Después de transcurrido un lapso de 14 minutos, la concentración de sustrato en la alimentación recupera su valor original.

Cuando el proceso es operado a lazo abierto, el sistema no es capaz de retornar al punto de operación original, puesto que, después de 14 minutos la trayectoria dinámica ha dejado su dominio de atracción (flecha sólida en la Fig. 6.2(a)). Desde el estado alcanzado luego de los

14 min el sistema evolucionará hacia una condición indeseada denominada de “lavado”, que se indica con la flecha a trazos y corresponde al estado $X = 0, S = 10$.

Para el proceso operado a lazo cerrado, por otra parte, el sistema es capaz de retornar al punto de equilibrio original una vez que desaparece la perturbación. Esto se debe a que la trayectoria dinámica, después de 14 minutos, aún pertenece a su dominio de atracción (Fig. 6.2(b)).

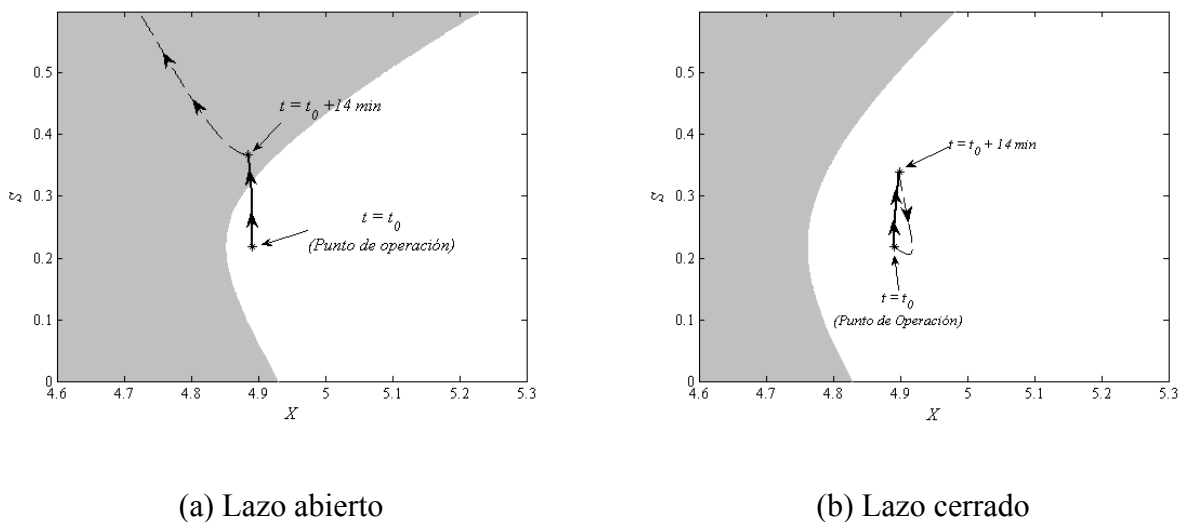


Fig. 6.2: Simulación dinámica del proceso de fermentación

6.4 Caso II: Sistema Reactor – Separador – Reciclo

A continuación se considera el esquema típico de un sistema reactor – separador – reciclo ilustrado en la Fig. 6.3. El modelo empleado es una versión adaptada del presentado en Vetukuri y col. (2006), el cual ha sido ampliamente utilizado en la literatura para el estudio de diferentes aspectos del comportamiento no lineal de este tipo de sistemas.

En este proceso, una corriente de alimentación fresca es transformada parcialmente en un reactor donde tiene lugar la reacción $A \rightarrow B$. La mezcla reaccionante (F, z) se alimenta a un separador de fases (flash) que opera a presión y temperatura constantes (T_{fl}, P_{fl}) . La corriente de vapor del flash (V, y_e) , rica en el producto B, sale del sistema, mientras la corriente líquida (L, x_e) , rica en el reactante A, se recircula al reactor. Se supone que las temperaturas de las corrientes de entrada al flash y de reciclo se controlan perfectamente por medio de los intercambiadores de calor HX1 y HX2.

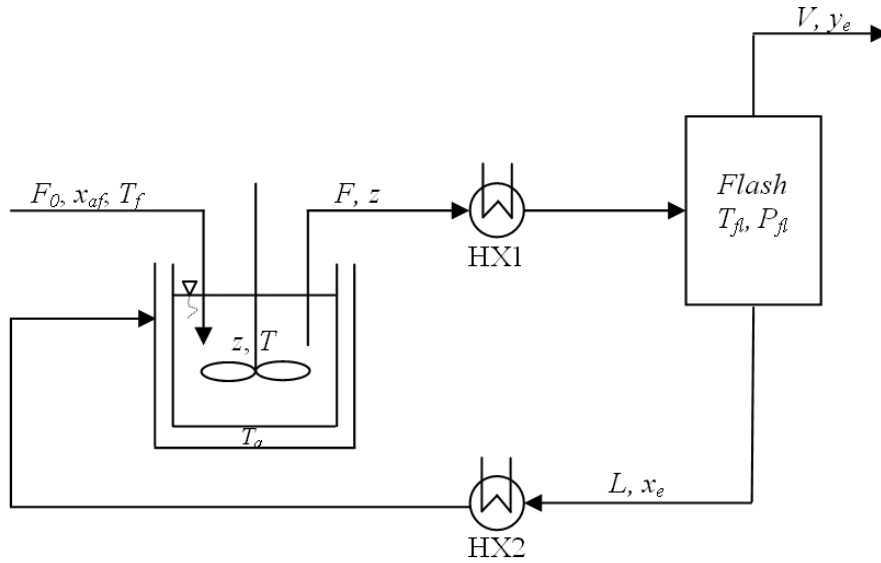


Fig. 6.3: Diagrama esquemático del sistema reactor – separador – reciclo

Se asume que se conoce la especificación externa de la corriente de entrada al proceso, F_0 , y que el volumen de la mezcla reaccionante permanece constante, controlado por medio del caudal de salida del reactor (F).

Los balances de masa y energía representados en forma adimensional para un reactor de volumen V_r , son:

$$\frac{dz}{dt} = x_{af} - y_e - D_{a1}z \exp(\theta) \quad (6.4)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = -\theta \left[1 + \frac{(y_e - z)}{(z - x_e)} + \beta D_{a1} \right] + B D_{a1} z \exp(\theta) \quad (6.5)$$

donde:

$$B = \frac{(-\Delta H)E}{(C_{pm}RT_f^2)}, \quad \beta = \frac{UA}{V_r k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_f}\right) C_{pm} \rho_m}, \quad (6.6)$$

$$D_{a1} = \frac{V_r k_0 \exp\left(-\frac{R}{RT_f}\right) \rho_m}{F_0}, \quad \theta = \frac{E(T - T_f)}{RT_f^2}$$

Aquí, θ , B , β , D_{a1} , representan las variables adimensionales de la temperatura en el reactor, del calor de reacción, del coeficiente de transferencia de calor y del número de Damköhler, respectivamente. El tiempo ha sido adimensionalizado usando el factor (M_r/F_0) , que corresponde a la relación entre la retención molar y el caudal de alimentación.

La termodinámica del flash se describe a través de las Ecs. (6.7) – (6.11), las cuales relacionan las composiciones de vapor y líquido con la temperatura y la presión de operación del equipo. Para los propósitos de este estudio, la operación de proceso se lleva a cabo a presión atmosférica (101325 Pa). Los parámetros del modelo se detallan en la Tabla 6.3.

Tabla 6.3. Propiedades físicas y parámetros del modelo

Parámetro	Descripción	Valor	Unidades
F_0	Caudal de alimentación al reactor	1	mol/seg
x_{af}	Fracción molar de A en la alimentación	1.0	---
y_e	Fracción de vapor de A en la corriente de vapor del flash	[0;0.15]	---
P_{fl}	Presión del <i>flash</i>	101325	Pa
K_0	Factor pre-exponencial	1.0×10^4	seg ⁻¹
E	Energía de activación	40000	J/mol
R	Constante de los gases	8.3144	J/(mol K)
C_{pm}	Calor específico de la mezcla	209.836	J/(mol K)
T_f	Temperatura de alimentación	298	K
T_a	Temperatura de del fluido refrigerante	298	K
ρ_m	Densidad de la mezcla	1200	mol/m ³
U	Coficiente de transferencia de calor	567.82	J/(seg m ² K)
Δh_A	Calor de vaporización de A	38331.15	J/mol
Δh_B	Calor de vaporización de B	28748.16	J/mol
A_A	Constante de Antoine	-21.4611	Pa
B_A	Constante de Antoine	-3974.04	K
A_B	Constante de Antoine	-26.0821	Pa
B_B	Constante de Antoine	-4366.82	K
D_r	Diámetro del reactor	[0.05; 0.15]	m
D_{fl}	Diámetro del <i>flash</i>	[0.05; 0.15]	m

$$y_e = K_A(T_{fl}, x_e)x_e \quad (6.7)$$

$$K_A(T_{fl}, x_e)x_e + K_B(T_{fl}, x_e)(1 - x_e) = 1 \quad (6.8)$$

$$K_i = \frac{P_i^{sat} T_{fl}}{P} \quad i: A, B \quad (6.9)$$

$$\ln\left(\frac{P_i^{sat}}{P}\right) = \left(\frac{\Delta h_i}{R}\right) \left(\frac{1}{T_i} - \frac{1}{T_{fl}}\right) \quad i: A, B \quad \text{Ecuación de Clausius-Clapeyron} \quad (6.10)$$

$$\ln(P) = A + \frac{B}{T_i} \quad i: A, B \quad \text{Ecuación de Antoine} \quad (6.11)$$

6.4.1 Diseño del Proceso

Con fines comparativos, se utilizan dos metodologías de diseño:

Metodología clásica: optimización de una función objetivo económica con restricciones de estabilidad asintótica sobre la solución de estado estacionario

Metodología propuesta: diseño según el problema (5.6) descrito en el Capítulo 5 de esta tesis.

El problema de diseño basado en consideraciones económicas busca optimizar una función objetivo de costo, con el requerimiento adicional de estabilidad asintótica del estado estacionario resultante. Este problema se puede formular matemáticamente como:

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{x}, \mathbf{d}} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{d}) \\ \text{s.a. } & \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) = \mathbf{0} \quad \text{a)} \\ & \text{Re}\{\lambda_i[\mathbf{A}(\mathbf{x}, \mathbf{d})]\} < 0 \quad i = 1, \dots, n \quad \text{b)} \\ & \mathbf{d}^L \leq \mathbf{d} \leq \mathbf{d}^U \\ & \mathbf{x}^L \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}^U \end{aligned} \quad (6.12)$$

$\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{d})$ es la función objetivo a minimizar, la restricción (6.12a) corresponde al estado estacionario del sistema dinámico (Ecs. 6.4 y 6.5) y la restricción (6.12b) garantiza que el punto de equilibrio sea asintóticamente estable.

La restricción de estabilidad asintótica puede expresarse en términos del determinante y la traza de la matriz Jacobiana del sistema dinámico \mathbf{A} (Strogatz, 1994). Por lo tanto, el problema de optimización (6.12) puede ser reformulado como:

$$\begin{aligned}
 & \min_{\mathbf{x}, \mathbf{d}} \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{d}) \\
 \text{s.a. } & \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) = \mathbf{0} \\
 & \det(\mathbf{A}) > 0 \\
 & \text{tra}(\mathbf{A}) < 0 \\
 & \mathbf{d}^L \leq \mathbf{d} \leq \mathbf{d}^U \\
 & \mathbf{x}^L \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}^U
 \end{aligned} \tag{6.13}$$

El problema (6.13) es un problema de programación no lineal (NLP) estándar, para cuya solución se emplea el programa GAMS/BARON.

Para los problemas (5.6) y (6.13), las variables de optimización son:

- volumen del reactor, (V_r)
- área de intercambio de calor en el reactor, (A_r)
- volumen del tanque de separación flash, (V_s)
- áreas de intercambio de calor HX1 y HX2 (A_{HX1} , A_{HX2})

Puesto que, el objetivo del proceso es producir el producto B, la composición del componente A en la corriente de vapor del flash, y_e , se restringe a pertenecer a un rango pequeño (Tabla 6.3).

La función objetivo económica a ser minimizada en el problema (6.13) es el costo de capital del proceso:

$$\varphi = \frac{1}{\beta_{\text{rep}}} (C_{\text{reactor}} + C_{\text{flash}} + C_{\text{int}}) \tag{6.14}$$

donde β_{rep} es el período de repago (3 años) y C_{reactor} , C_{flash} y C_{int} son los costos individuales expresados en \$/año del reactor, del separador flash y de los intercambiadores de calor respectivamente. El costo de capital del reactor depende de su tamaño y se calcula de la siguiente manera:

$$C_{\text{reactor}} = 17639(D_r)^{1.066} + (2D_r)^{0.802} \tag{6.15}$$

donde D_r es el diámetro del reactor en metros (Tabla 6.3). Asumiendo que la altura del reactor es dos veces su diámetro, la relación entre el diámetro y el volumen es:

$$D_r = (0.6366V_r)^{1/3} \quad (6.16)$$

El área de transferencia de calor del reactor depende de su diámetro, de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$A_r = 2\pi D_r^2 + \frac{\pi}{4} D_r^2 \quad (6.17)$$

El costo de capital del separador flash es función de su diámetro, D_{fl} , de acuerdo con la ecuación:

$$C_{\text{flash}} = 7308.26(D_{fl})^{1.066} + 548.8(D_{fl})^{1.55} \quad (6.18)$$

El diámetro del separador flash depende del caudal de entrada F al equipo:

$$D_{fl} = 3.9929 \left(\frac{F}{\rho_m} \right)^{1/3} \quad (6.19)$$

Los costos de capital de los intercambiadores de calor dependen de sus áreas de transferencia, A_{HX1} y A_{HX2} , las cuales están involucradas en los balances de energía:

$$Q_{\text{HX1}} = V\Delta h - FC_p(T - T_{fl}) = UA_{\text{HX1}}(\Delta T_{ml})_{\text{HX1}} \quad (6.20)$$

$$Q_{\text{HX2}} = LC_{pm}(T_{fl} - T) = UA_{\text{HX2}}(\Delta T_{ml})_{\text{HX2}} \quad (6.21)$$

Donde $(\Delta T_{ml})_{\text{HX1}}$ y $(\Delta T_{ml})_{\text{HX2}}$ son las temperaturas medias logarítmicas en los intercambiadores HX1 y HX2, respectivamente. Se supone que el caudal circulante de los fluidos de servicio para ambos intercambiadores es relativamente grande, de tal manera que su temperatura, T_a , puede asumirse constante para los cálculos de la temperatura media logarítmica.

6.4.2 Resultados

En la Tabla 6.4 se presentan los resultados de los dos problemas de diseño, (6.13) y (5.6), para el sistema RSR descrito. Las soluciones correspondientes se muestran en el espacio de estados en las Figs. 6.4(a) y (b).

El costo de capital para el diseño basado en la optimización del DA se calcula a partir de la Ec. (6.14) para los valores correspondientes a la solución del problema (5.6).

En las Figs. 6.4(a) y (b) se muestran las isonulas del sistema (6.4) y (6.5) (líneas sólidas y a trazos), junto con el dominio de atracción del punto de operación asintóticamente estable resultante de cada uno de los problemas de optimización (región blanca). En las Figs. 6.5(a) y

(b) se muestra la bola B_r (línea sólida) junto con la superficie $\frac{\|\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{1}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0$ (línea a trazos) expresadas en variables de desviación, esto es, $x_1 = z - z_s$ y $x_2 = \theta - \theta_s$. También se indica el punto de intersección entre las dos superficies.

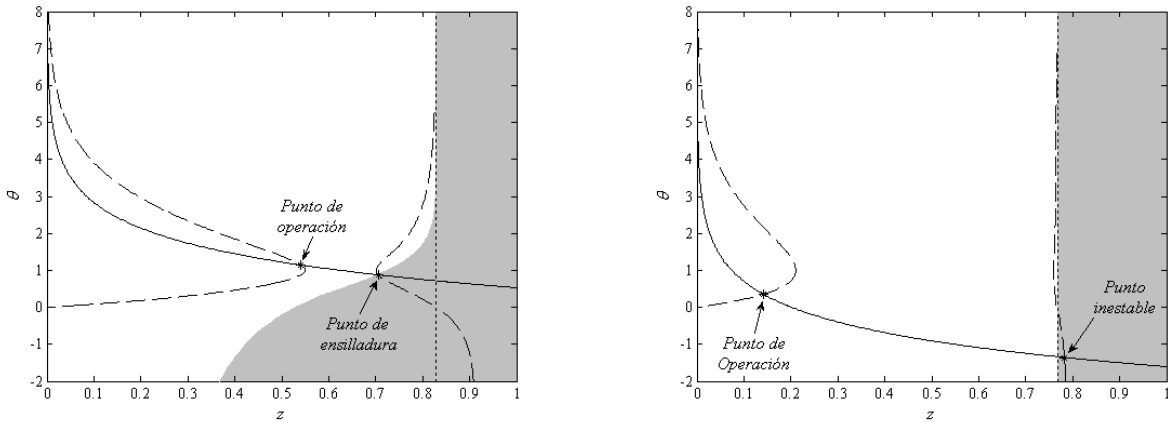
En la Fig. 6.4(a) se pueden apreciar dos puntos de equilibrio en el espacio de estados: el nodo estable y un nodo silla. Se observa que para este caso, la frontera del dominio de atracción del punto de operación corresponde al manifold estable del nodo silla.

Por otra parte, la frontera del dominio de atracción correspondiente a la solución del problema (5.6) está dada por la región del espacio de estados donde tiene lugar la singularidad del denominador de la ecuación (6.5). El segundo punto de equilibrio, que correspondía a una silla en la solución del problema (6.13), se convierte en un nodo inestable que se encuentra ubicado al otro lado de la frontera de estabilidad del punto de operación. Evidentemente, ha ocurrido un cambio significativo en la topología del sistema por el efecto de la optimización del radio de la bola B_r .

Tabla 6.4. Resultados de diseño del sistema RSR

$B = 14, F_0 = 1$	Problema (6.13)	Problema (5.5)
$D_r [0.2; 1.5]$	0.6485	1.4157
$y_e [0; 0.15]$	0.15	0.1194
β	16.0595	7.3564
x_e	0.8283	0.7954
T_{fl}	348.35	343.5032
T	319.12	303.78
V_r	0.4283	4.4569
A_r	2.9726	14.1669
Da_1	0.5008	5.2112
D_{fl}	0.5048	0.3765
Q_{fl}	4.0687×10^4	3.8278×10^4
A_{HX1}	1.7365	3.5017
A_{HX2}	0.5807	0.0047
F	2.3562	1.0061
L	1.3562	0.0061
V	1.00	1.00
z_s	0.5404	0.1235
θ_s	1.1442	0.3133
$\lambda_{1s}(\mathbf{A})$	$-0.0366 + 2.8969i$	-13.6992
$\lambda_{2s}(\mathbf{A})$	$-0.0366 - 2.8969i$	-20.4433
$\lambda_{1s}(\mathbf{P})$	7.1696	0.0150
$\lambda_{2s}(\mathbf{P})$	140.9489	0.5711
costo	12.5154×10^3	27.1627×10^3
r	0.5307×10^{-2}	1.7393×10^{-2}

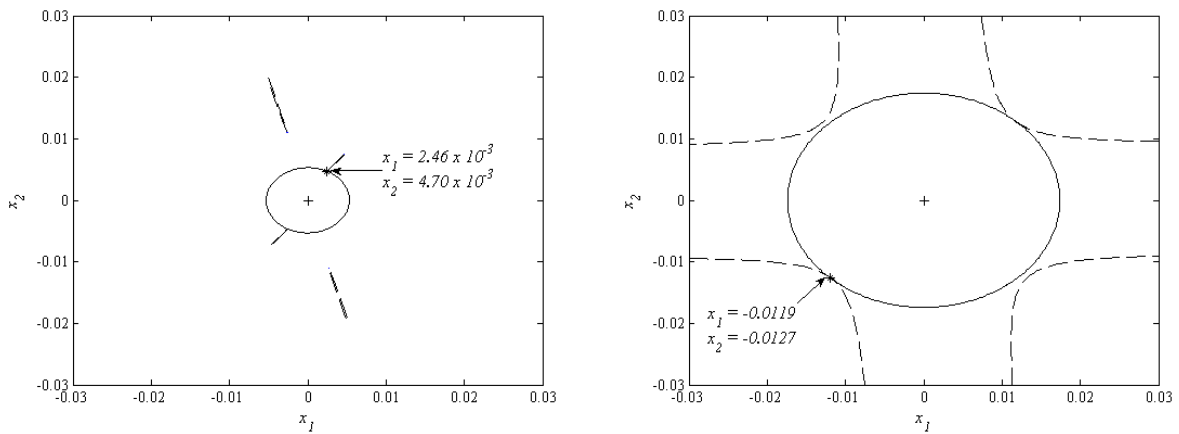
Por inspección del valor de la función de costo (Tabla 6.4) y de la comparación de los DA (Figs. 6.4(a) y (b)) se puede inferir la naturaleza conflictiva entre los objetivos económicos y de operabilidad. En este caso, la operabilidad esta relacionada con la extensión de la región de estabilidad del punto de equilibrio operativo del proceso. Un dominio de atracción extenso (Fig. 6.4(b)) se puede obtener a expensas de un peor valor de la función objetivo económica.



(a) Problema (6.13)

(b) Problema (5.6)

Fig. 6.4: Isonulas y dominio de atracción



(a) Problema (6.13) en variables de desviación $x_1 = z - z_s, x_2 = \theta - \theta_s$

(b) Problema (5.6) en variables de desviación $x_1 = z - z_s, x_2 = \theta - \theta_s$

Fig. 6.5: Bola B_r (línea sólida), superficie $\frac{\|f_1(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{x}\|} - \frac{1}{2\lambda_{\max}(\mathbf{P})} = 0$ (línea a trazos)

Desde un punto de vista físico, el tamaño de reactor es mucho más pequeño cuando el objetivo de diseño es económico, respecto del correspondiente a la optimización del DA. Por este motivo, aunque el reactor opera a niveles de temperatura relativamente altos, su conversión es baja. Esta baja conversión, requiere del procesamiento de grandes caudales internos (F y L), con el consecuente incremento en los tamaños del flash y de uno de los

intercambiadores de calor. Sin embargo, el bajo costo de un reactor pequeño compensa los mayores costos de las demás unidades.

Por otro lado, dado que el tamaño del reactor obtenido por medio de la optimización del DA es mayor que el correspondiente al del óptimo económico, los caudales internos son menores, puesto que se trabaja a una mayor conversión. El hecho de trabajar con volúmenes de reacción mayores, permite operar a menor temperatura para lograr conversiones aceptables.

La relación entre un DA grande y los valores de las variables de diseño en la solución no es obvia. Esto se debe a la presencia de no linealidades complejas en las ecuaciones de balance. Sin embargo, es claro que la temperatura de reacción produce grandes efectos sobre el sistema por la presencia de los términos exponenciales de las Ecs. (6.4) y (6.5).

Un tamaño de reactor pequeño, resultante de la optimización económica, requiere altas temperaturas de operación para llevar a cabo la conversión necesaria para cumplir con los requerimientos del proceso. Por otra parte, el reactor más grande, obtenido por la optimización del DA, requiere de temperaturas moderadas para lograr una conversión aceptable. En este caso, el sistema opera en un punto alejado de la frontera del DA haciendo al proceso más flexible frente a perturbaciones.

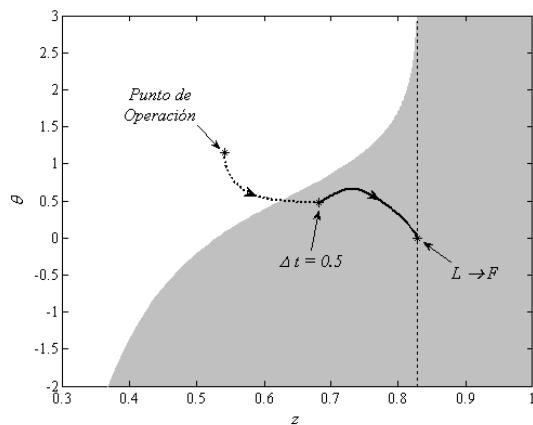
También se puede observar de la Tabla 6.4, que la parte real de los autovalores del diseño óptimo económico están cercanas al eje imaginario, mientras que los correspondientes al del DA óptimo se ubican profundamente en el hemisferio estable del espacio complejo. Este hecho proporciona un indicio intuitivo de la robustez del sistema con respecto a la estabilidad asintótica. Si la parte real de los autovalores, en valor absoluto, del punto de operación son relativamente grandes, el sistema se encuentra lejos de sufrir bifurcaciones por variación en sus parámetros. Por lo tanto, en el caso de una perturbación pequeña en alguno de los parámetros, el nuevo estado estacionario permanecerá estable y próximo al equilibrio original.

Con el fin de ilustrar el efecto práctico de contar con un dominio de atracción grande, se procedió a introducir en ambos diseños una perturbación tipo escalón en las temperaturas de alimentación al reactor (T_f) y del fluido refrigerante (T_a). El escalón en ambas temperaturas es de 298 a 290 K. Luego de un lapso de tiempo de 0.5 en valor adimensional, dichas temperaturas retornan a su valor original.

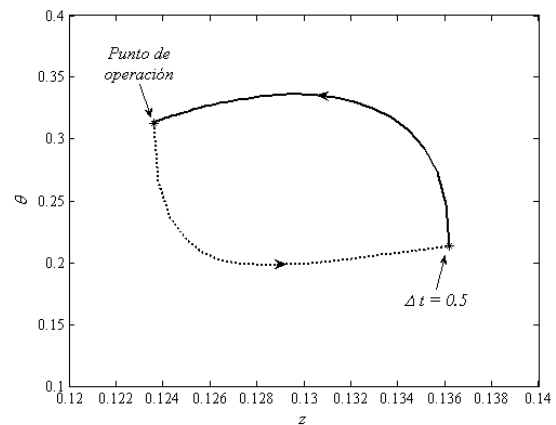
Cabe recordar, que en cada instante de tiempo, el calor transferido por el intercambiador HX1 es el necesario para lograr que las composiciones de líquido y vapor en el separador flash permanezcan constantes. Asimismo, el calor transferido por el intercambiador HX2 es el necesario para que la temperatura de la corriente de reciclo sea igual a la temperatura del reactor.

Se puede observar de la Fig. 6.6(a), que para el diseño con función objetivo económica (6.13), el sistema evoluciona más allá de la frontera del dominio de atracción del punto de operación del proceso (flecha punteada).

Una vez eliminada la perturbación, el sistema es incapaz de regresar al punto de operación original, evolucionando hacia una condición donde la totalidad de la corriente de salida del reactor es recirculada. En esta situación, la composición z se aproxima a x_e y por lo tanto, el caudal V tiende a cero y el caudal L tiende a F (flecha sólida). Este escenario es claramente indeseable desde el punto de vista operacional del proceso.



(a) Problema (6.13)



(b) Problema (5.6)

Fig. 6.6: Simulación dinámica del proceso reactor – separado – reciclo

La Fig. 6.6(b) presenta la evolución del sistema correspondiente al diseño obtenido por la optimización del radio de la bola B_r (problema 5.6). El sistema evoluciona al principio hacia un nuevo punto de equilibrio ($z = 0.1362$, $\theta = 0.2132$) cercano al punto de operación (flecha punteada en la Fig. 6.6(b)). Una vez eliminada la perturbación, el sistema regresa al punto de operación original, puesto que el estado alcanzado por el sistema perturbado se encuentra en el interior de su dominio de atracción (flecha sólida en la Fig. 6.6(b)).

Cabe aclarar que para una mejor visualización de los resultados, se emplearon diferentes escalas en los ejes de las Figs. 6.6(a) y 6.6(b).

6.5 Consideraciones Finales

En este capítulo se realizaron aplicaciones ingenieriles de los resultados obtenidos en el Capítulo 5. Para el caso del fermentador, un análisis del DA a lazo abierto advierte que el sistema opera en un punto estable ubicado muy cerca de la frontera de la región de estabilidad asintótica. Esto implica que frente a ciertas perturbaciones, existe la posibilidad de que el sistema abandone el DA sin posibilidad de retornar a su condición operativa original una vez removida la perturbación. La implementación de un controlador simple, mejora las características dinámicas del sistema, pues logra que el punto de operación este más alejado de la frontera de su dominio de atracción incrementando su robustez frente a la ocurrencia de perturbaciones.

En el caso del diseño del sistema reactor – separador – reciclo, como era de esperarse, el costo del diseño para un DA óptimo (problema 5.6), es mayor que el correspondiente al diseño económico óptimo (problema 6.13), evidenciando la naturaleza conflictiva entre los objetivos económico y de robustez dinámica.

Desde el punto de vista físico, un DA mayor se logra trabajando a niveles bajos de temperatura en el reactor. Esto se debe a que la temperatura tiene un efecto significativo en los balances (6.13 y 6.14) debido al término exponencial presente en la cinética de la reacción.

Del análisis de ambos ejemplos resulta evidente que dominios de atracción amplios proveen “zonas de amortiguamiento” en el espacio de estados, en las cuales el sistema puede evolucionar bajo perturbaciones antes de cruzar las fronteras del dominio de atracción del punto de operación.

CAPÍTULO 7

CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

7.1 Conclusiones sobre la Contribución

En esta tesis se abordó el problema de análisis y diseño de sistemas dinámicos no lineales basados en el concepto de dominio de atracción de los puntos de equilibrio asintóticamente estables y en métodos de optimización.

Específicamente, los DA se estudiaron empleando la teoría de estabilidad de Lyapunov. Existen en la literatura una gran cantidad de contribuciones que emplean elementos de esta teoría para estimar dominios de atracción. Sin embargo, la gran mayoría de esas aplicaciones, se limitan sin embargo a modelos con no linealidades de tipo polinomiales. De modo que una de las contribuciones de esta tesis (Capítulo 4) es una metodología para abordar el problema de la estimación de DA de sistemas con no linealidades de tipo general. La metodología propuesta emplea funciones de Lyapunov de tipo racional y utiliza métodos de optimización global.

Las estimaciones de los DA obtenidas en las experiencias realizadas con la metodología propuesta, resultan superiores a las obtenidas empleando funciones de Lyapunov de tipo polinomial. Si bien las estimaciones propuestas también subestiman en general el DA del equilibrio bajo estudio, las mismas suelen proporcionar muy buenas aproximaciones en las proximidades de sus fronteras.

Otra contribución importante de la tesis (Capítulo 5) es el desarrollo de una estrategia de diseño de sistemas dinámicos no lineales, basada en la optimización de una medida indirecta de la extensión del DA del equilibrio operativo. Este desarrollo está motivado por el hecho de que, a pesar que los enfoques tradicionales de diseño de sistemas implican optimizar una función objetivo (normalmente de tipo económico) garantizando simultáneamente la estabilidad asintótica del punto operativo, no tienen en cuenta la extensión ni la forma del DA

de la solución, lo cual es imprescindible para caracterizar la robustez del sistema en relación a la respuesta frente a perturbaciones.

La metodología propuesta en el Capítulo 5, consiste en maximizar el radio de una bola en el espacio de estados en la que es posible asegurar definición negativa de la derivada temporal de una función de Lyapunov de tipo cuadrático y por lo tanto la existencia de un DA. Esta metodología emplea una estrategia de optimización en dos niveles. En el nivel interior se resuelve un problema de optimización global determinístico con el fin de calcular estimaciones del dominio de atracción para cada realización de las variables de diseño, estas a su vez se manipulan en el nivel exterior con el objeto de optimizar la métrica adoptada empleando un algoritmo de búsqueda estocástico.

Si bien, la estimaciones resultantes son muy conservadoras dado que se utilizan funciones de Lyapunov cuadráticas, se consigue un incremento efectivo del tamaño del DA real debido al “efecto de empuje” que ejerce sobre sus fronteras la maximización del radio de la bola B_r . Adicionalmente, el incremento de tamaño del DA también puede manifestarse a través de un desplazamiento del punto de equilibrio solución en el espacio de estados.

En el Capítulo 6 se aplicó la metodología propuesta en el capítulo anterior al diseño de un controlador proporcional realimentado de un fermentador continuo. El sistema a lazo abierto opera en un punto de equilibrio asintóticamente estable muy próximo a la frontera de su dominio de atracción. La implementación de la ley de control permite incrementar la distancia entre el punto de equilibrio y la frontera del DA lo que confiere robustez al sistema en lo que respecta a su desempeño frente a perturbaciones.

Además, en este mismo capítulo, también se aplicó esta metodología a un sistema reactor – separador – reciclado. Se adoptó un esquema de control típico y se determinaron los parámetros operativos y de diseño de modo de obtener un punto de equilibrio asintóticamente estable con un amplio dominio de atracción. Los resultados se compararon con los correspondientes a un diseño clásico en el que se minimiza el costo de capital del proceso. Como era de esperarse, la solución del problema de optimización de DA tiene un peor valor de función objetivo económica que el diseño tradicional, pero una mayor región de estabilidad asintótica en torno al punto operativo, lo que evidencia la naturaleza conflictiva entre ambos objetivos.

7.2 Trabajos Futuros

Si bien la metodología de diseño propuesta en esta tesis garantiza una solución estable y con un dominio de atracción óptimo en el sentido de la métrica propuesta, tanto el algoritmo estocástico del nivel exterior como el algoritmo de optimización global del nivel interior son muy demandantes computacionalmente. A medida que el modelo crece en número de estados y de parámetros de diseño, los tiempos de cómputo se incrementan significativamente.

Por otra parte, si bien la optimización indirecta de la extensión del dominio de atracción asegura que la solución es robusta frente a perturbaciones, no se posee una descripción cuantitativa de esta robustez dado que se desconoce el tamaño y la forma reales del dominio resultante.

Como continuación natural de este trabajo de tesis, se propone extender la metodología descrita para resolver en forma eficiente el problema de diseño óptimo del sistema dinámico no lineal de gran tamaño, garantizando la estabilidad robusta de la solución. También se persigue cuantificar el grado de robustez del diseño por medio de la caracterización del dominio resultante o, alternativamente, imponiendo que el dominio de atracción tenga ciertas dimensiones mínimas que aseguren la adecuada robustez frente a las posibles perturbaciones.

Para efectuar la optimización del diseño se considerará la posibilidad de continuar empleando algoritmos evolutivos. Estas técnicas posibilitan un tratamiento natural de las potenciales discontinuidades y poseen buenas propiedades de convergencia al óptimo global. No se descarta el empleo de algoritmos determinísticos aunque se entiende que su utilidad puede verse limitada por la presencia de las mencionadas discontinuidades y de un número elevado de soluciones locales.

Para tratar el problema de la estabilidad robusta se analizará en una primera etapa el empleo de estimaciones del dominio de atracción basado en funciones de Lyapunov cuadráticas. Si bien este tipo de estimaciones suelen ser muy conservadoras, se ha comprobado que su optimización tiene un efecto significativo en el agrandamiento del dominio de atracción real, y su implementación es más sencilla que otras técnicas de estimación de dominios de atracción como se ha demostrado en esta tesis.

Para evaluar el grado resultante de robustez, se propone caracterizar el dominio de atracción real, ya sea a través del estudio de los equilibrios cercanos que determinan sus fronteras o por

intermedio de simulaciones dinámicas rigurosas. Alternativamente se considerará el empleo de elementos de la teoría de diseño bajo incertidumbre (Raspanti y col. 2000) para forzar que la solución posea la mínima robustez necesaria para afrontar el espacio previsible de perturbaciones.

Por otra parte, dado que el problema de diseño es de naturaleza múltiple objetivo entre optimalidad económica y operabilidad dinámica, se analizarán metodologías para generar curvas Pareto que permitan evaluar diferentes diseños de ambos objetivos en conflicto.

Las metodologías se aplicarán al diseño de sistemas de interés ingenieril y de mayor tamaño que los actualmente empleados en los estudios académicos. Un proceso que se pretende estudiar es el sistema reacción-separación-reciclo de particular interés en ingeniería química, por su riqueza dinámica e importancia industrial. Se considerará por ejemplo el modelo del denominado Tennessee Eastman Challenge Process (Ricker y Lee, 1995; Blanco y col., 2004), una planta inestable con reacción en fase gas, que representa un caso de estudio importante para la comunidad de ingeniería de sistemas en dinámica, control y optimización de procesos.

Otra aplicación interesante, de importancia creciente a nivel científico y tecnológico, son los sistemas biomédicos. Estos sistemas, pasibles de ser modelables matemáticamente, presentan comportamientos complejos desde el punto de vista de la no-linealidad dinámica y características similares a los sistemas con reciclo arriba descritos.

REFERENCIAS

- Amato F., C. Cosentino and A. Merola (2007); On the Region of Attraction of Nonlinear Quadratic Systems. *Automatica*, 43 (12), pp. 2119-2123.
- Bequette B. W. (1998); *Process Dynamics: Modeling, Analysis and Simulation*. Prentice Hall.
- Berger J. S. and D. D. Perlmutter (1964); Chemical Reactor Stability by Lyapunov's Direct Method. *American Institute of Chemical Engineering Journal*, 10 (2), pp. 233-245.
- Berger J. S. and D. D. Perlmutter (1965); An Extended Region of Asymptotic Reactor Stability. *Chemical Engineering Science*, 20 (2), pp. 147-156
- Blanco A. M. (2003). *Análisis de la Interacción entre el Diseño y Operabilidad de Procesos*. Tesis Doctoral. Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca – Argentina
- Blanco A. M. and J. A. Bandoni (2003); Optimal Design of Stable Processes. *Latin American Applied Research* 33 (2), pp. 123-128
- Blanco A. M., J. A. Bandoni and L. T. Biegler (2004); Re-design of the Tennessee Eastman Challenge Process: An Eigenvalue Optimization Approach. *Memorias del FOCAPD 2004*, Princeton, USA, pp. 517-520.
- Blanco A. M. and J. A. Bandoni (2007); Eigenvalue Optimization Based Formulations for Dynamics and Control Problems. *Chemical Engineering Process*, 46 pp. 1192-1199.

- Chang Y. and N. V. Sahihidis (2005); Optimization of Methabolic Pathways Under Stability Considerations. *Computers & Chemical Engineering*, 29 pp. 467-479.
- Chesi G., A. Garulli, A. Tesi and A. Vicino, (2002); LMI-based Construction on Homogeneous Lyapunov Functions for Systems with Structures Uncertainties. *Proceeding of the 4th IEEE conference on decision and control*. Las Vegas – Nevada – USA.
- Chesi G., (2003); Estimating the Domain of Attraction: a Light LMI Technique for a Class of Polynomial Systems. *Proceeding of the 42th IEEE. Conference on decision and control*. Maui – Hawaii – USA.
- Chesi G., (2004); On the Estimation of the Domain of Attraction for Uncertain Polynomial System Via LMIs. *Proceedings of the 43th IEEE. Conference on decision and control*. Atlantis – Paradise Island – Bahamas.
- Chesi G. (2007); Estimating the Domain of Attraction via Union of Continuous Families of Lyapunov Estimates. *Systems and Control Letters*, 56 (4) pp. 326-333.
- Chesi G. (2009). Estimating the Domain of Attraction for Non-polynomial systems via LMI Optimizations. *Automatica*, 45 (6), pp. 1536-1541
- Chiang H. and J. S. Thorp (1989); Stability Regions of Nonlinear Dynamical System: A Constructive Methodology. *IEEE Transactions on Automatic Control*, (34), pp. 1229 – 1241.
- Chiang H. D., C. C. Chu and G. Cauley (1995); Direct Stability Analysis of Electric Power Systems Using Energy Functions: Theory, Applications, and Perspective. *Proceedings of the IEEE*, 83 (11), pp. 1497-1529.
- Dominguez L. F., and E. N. Pistikopoulus (2009); Global Optimization of Integer and Mixed-integer Bi-level Programming Problems via Multi-parametric Programming. *Proceedings of PSE 2009*; Salvador Bahía - Brasil.

- Fogler S. H. (2006); Elements of Chemical Reaction Engineering. Prentice Hall, New Jersey.
- GAMS (2008a). A Users' Guide. GAMS Development Corporation.
- GAMS (2008b). The Solvers Manual. GAMS Development Corporation.
- Garhyan P., S. S. E. H. Elnashaie, S. M. Al-Haddad, G. Ibrahim and S. S. Elshishini (2003);
Exploration and Exploitation of Bifurcation/Chaotic Behavior of a Continuous
Fermentor for the Production of Ethanol. Chemical Engineering Science 58 (8), pp.
1479-1496.
- Garhyan P., and S. S. E. H. Elnashaie, (2004); Static/Dynamic Bifurcation and Chaotic
Behavior of an Ethanol Fermentor. Industrial and Engineering Chemistry Research, 43
(5), pp. 1260-1273
- Genesio R., M. Tartaglia and A. Vicino (1985); On the Estimation of Asymptotic Stability
Regions: State of the Art and New Proposals. IEEE Transactions on Automatic Control,
30 (8) pp. 747-755.
- Gerhard J., M. Mönnigmann and W. Marquardt (2008); Steady State Optimization with
Guaranteed Stability of a Tryptophan Biosynthesis Model. Computers and Chemical
Engineering, 32 (12), pp. 2914-2919.
- González A. H. and D. Odloak (2009); Enlarging the Domain of Attraction of Stable MPC
Controllers, Maintaining the Output Performance. Automatica, 45 (4), pp. 1080-1085
- Hachicho O. and B. Tibken (2002); Estimating Domains of Attraction of a Class of Nonlinear
Dynamical Systems with LMI Methods Based on the Theory of Moments. Proceedings
of the IEEE Conference on Decision and Control 3, pp. 3150-3155.
- Hachicho O. (2007); A Novel LMI-based Optimization Algorithm for the Guaranteed
Estimation of the Domain of Attraction Using Rational Lyapunov Functions. Journal of
the Franklin Institute, 344, pp. 535-552.

Hahn W. (1967); Stability of Motion. Springer-Verlag. New York.

Hashemzadeh F. and M. Yazdanpanah (2006); Semi-global Enlargement of Domain of Attraction for a Class of Affine Nonlinear Systems. Proceedings of the IEEE International Conference on Control Applications, art. no. 4776991, pp. 2257-2262

Hiskens I. A. and R. J. Davy (1996); Lyapunov Functions Analysis of Power Systems with Dynamic Loads. Proceeding of the 35th conference on decision and control, Kobe – Japan.

Jarzebski A. B. (1992); Modelling of Oscillatory Behaviour in Continuous Ethanol Fermentation. Biotechnology Letters, 14 (2), pp. 137-142

Kaslik E., A. M. Balint and S. Balint (2005); Methods for Determination and Approximation of the Domain of Attraction. Nonlinear Analysis, Theory, Methods and Applications, 60 (4), pp. 703 – 717.

Kennedy J., R. C. Eberhart and Y. Shi (2001); Swarm Intelligence. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers.

Khalil H. K. (1996); Nonlinear Systems. Prentice Hall. New Jersey.

Kokossis A. C. and C. A. Floudas (1994); Stability in Optimal Design: Synthesis of Complex Reactor Networks. American Institute of Chemical Engineering Journal, 40 (5), pp. 849-861.

Korobeinikov A. and P. Maini (2005); Non-linear Incidence and Stability of Infectious Disease Models. Mathematical Medicine and Biology, vol. 22, pp. 113-128.

La Salle J. P. (1960); Some Extensions of Lyapunov's Second Method. IRE Transactions on Circuit Theory, vol. CT-7, pp. 520-527, 1960.

- Levin A., (1994). An Analytical Method of Estimating the Domain of Attraction for Polynomial Differential Equations. IEEE transaction on automatic control, vol. 39, no. 12.
- Limon D., T. Alamo and E. F. Camacho (2005); Enlarging the Domain of Attraction of MPC Controllers. Automatica, 41 (4), pp. 629-635.
- Lu X., H. Li and C. L. P. Chen (2010); Robust Optimal Design with Consideration of Robust Eigenvalue Assignment. Industrial and Engineering Chemistry Research, 49 (7) pp. 3306-3315.
- Luyben M. L. and W. L. Luyben, (1997); Essentials of Process Control. New York: The McGraw-Hill Companies Inc.
- Luyben W. L., B. D. Tyreus and M. L. Luyben (1998); Plant Wide Process Control. New York: The McGraw-Hill Companies Inc.
- Lyapunov A. M., (1992). The General Problem of the Stability of Motion. Traducido y Editado por Fuller, A. T. International Journal of control, vol. 55, Issue 3.
- Maranas C. D. and C. A. Floudas (1995); Finding all Solutions of Nonlinearly Constrained Systems of Equations. Journal of Global Optimization, 7 (4), pp. 337-363
- Matallana L. G., A. M. Blanco and J. A. Bandoni (2008); Eigenvalue Optimization Techniques for Nonlinear Dynamic Analysis and Design. Chapter 2.10. in Optimization in Food Engineering (Contemporary Food Engineering). Taylor and Francis. p. 271-293
- Matlab Mathworks. (2010a). Genetic Algorithm and Direct Search Toolbox 3 User's Guide. The Mathworks Inc.
- Matlab Mathworks. (2010b). Optimization Toolbox 5 User's Guide. The Mathworks Inc.

- Merola A., C. Cosentino and F. Amato (2008); An Insight Into Tumor Dormancy Equilibrium Via the Analysis of its Domain of Attraction. *Biomedical Signal Processing and Control*, 3 (3), pp. 212-219
- Michalewicz Z. (1996). Heuristic Methods for Evolutionary Computation Techniques. *Journal of Heuristics*, 1 (2), pp. 177-206.
- Mönnigmann M. and W. Marquardt (2003). Steady-State Process Optimization with Guaranteed Robust Stability and Feasibility. *American Institute of Chemical Engineering Journal*, 49 (12), pp. 3110-3126.
- Mönnigmann M. and W. Marquardt (2005); Steady-state Process Optimization with Guaranteed Robust Stability and Flexibility: Application to HDA Reaction Section. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 44 (8), pp. 2737-2753.
- Noble B and W. Daniel (1989); *Applied Linear Algebra*. Prentice-Hall.
- Overton M. (1992); Large-Scale Optimization of Eigenvalues. *SIAM Journal on Optimization*, 2, pp. 88–120.
- Papachistodoulou A. and S. Pragna (2002); On the Construction of Lyapunov Functions Using the Sum of Squares Decomposition. *Proceedings of the 41th IEEE conference on decision and control, Las Vegas – Nevada – USA*.
- Papachistodoulou A. and S. Pragna (2005); Analysis of Non-Polynomial Systems Using the Sum of Squares Decomposition. *Positive Polynomials in Control, Lecture notes in control and information sciences*, 312, pp. 23-43
- Pellegrini L., G. Biardi and M. G. Grotoli (1988); Determination of the Region of Asymptotic Stability for a CSTR. *Computers and Chemical Engineering*, 12 (2-3), pp. 237-241
- Pushpavanam S. and A. Kienle (2001); Nonlinear Behavior of an Ideal Reactor Separator Network with Mass Recycle. *Chemical Engineering Science*, 56 (8), pp., pp.2837-2849.

- Raspani C. G., J. A. Bandoni and L. T. Biegler (2000); *New Strategies for Flexibility Analysis and Design Under Uncertainty*. *Computers and Chemical Engineering*, 24 (9-10), pp. 2193-2209
- Reay, D., C. Ramshaw and A. Harvey (2008). *Process Intensification: Engineering for Efficiency, Sustainability and Flexibility*. Elsevier.
- Reklaitis G. V., A. Ravindran and K. M. Ragsdell (1983); *Engineering Optimization: Methods and Applications*. John Wiley and Sons.
- Ricardez-Sandoval L. A., H. M. Budman and P. L. Douglas (2008); *Simultaneous Design and Control of Processes Under Uncertainty: A Robust Modelling Approach*. *Journal of Process Control*, 18 (7-8), pp. 735-752.
- Ricker N. L. and J. H. Lee (1995); *Nonlinear Modeling and State Estimation for the Tennessee Eastman Challenge Process*. *Computers & Chemical Engineering*, 19 (9) pp. 983-1005.
- Ringertz U. T. (1997). *Eigenvalues in Optimum Structural Design*. In: A.R. Conn, L.T. Biegler, T.F. Coleman and F. Santosa, Editors, *Proceedings of an IMA Workshop on Large-Scale Optimization Part I*, pp. 135–149.
- Storn R. and K. Price (1997); *Differential Evolution, a Simple and Efficient Heurist for Global Optimization Over Continuous Spaces*. *Journal of Global Optimization*, 11 pp. 341–359.
- Strogatz S. H. (1994). *Nonlinear Dynamics and Chaos*. Addison – Wesley Publishing Company.
- Szederkényi G., N. R. Kristensen, K. M. Hangos and S. B. Jorgensen (2002); *Nonlinear Analysis and Control of a Continuous Fermentation Process*. *Computers and Chemical Engineering*, 26, pp. 659-670.

- Tan W. (2006). Nonlinear Control Analysis and Synthesis using Sum of Squares Programming, University of California, Berkeley, PhD Thesis.
- Tawarmalani M. and N. V. Sahinidis (2002); Convexification and Global Optimization in Continuous and Mixed-Integer Nonlinear Programming: Theory, Algorithms, Software, and Applications. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Vol. 65 in “Nonconvex Optimization And Its Applications” series.
- Taylor R. and R. Krishna (2000), Modeling Reactive Distillation. Chemical Engineering Science, 55 (22), pp. 5183-5229
- Tibken B., and O. Hachicho (2000); Estimations of the Domain of Attraction for Polynomial System Using Multidimensional Grids. Proceedings of the IEEE Conference on Decision and Control, 4, pp. 3870-3874.
- Topcu U., A. Packard and P. Seiler (2008); Local Stability Analysis Using Simulations and Sum-Of-Squares Programming. Automatica, 44 (10), pp. 2669-2675
- Tsoulos I. G. and A. Stavrakoudis (2009); On Locating All Roots of Systems of Nonlinear Equations Inside Bounded Domain Using Global Optimization Methods. Nonlinear Analysis: Real World Applications, Nonlinear Analysis: Real World Applications, 11 (4), pp. 2465-2471
- Vannelli A. and M. Vidyasagar., (1985); Maximal Lyapunov Functions and Domains of Attraction for Autonomous Nonlinear Systems. Automatica, 21, 69-80.
- Vetukuri S. R. R., S. Pushpavanam, K. P. Zeyer and A. Kienle (2006); Nonlinear Behavior of Coupled Reactor-Separator Systems with Azeotropic Vapor-Liquid Equilibriums (VLEs): Comparison of Different Control Strategies. Industrial and Engineering Chemistry Research, 45 (3), pp. 1019-1028
- Vidyasagar M. (1993); Nonlinear Systems Analysis. Prentice Hall. New Jersey.

Wang W. and S. Ruan (2004); Bifurcations in an Epidemic Model with Constant Removal Rate of Infectives. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, vol. 291, pp. 775-793.

Zeyer K.-P., A. A. Kulkarni, A. Kienle, M. V. Kumar and S. Pushpavanam (2007); Nonlinear Behavior of Reactor-Separator Networks: Influence of the Energy Balance Formulation. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 46 (4), pp. 1197-1207.

Zubov V. I. (1964). *Methods of A. M. Lyapunov and their applications*. P. Noordhoff Limited, Groningen.