

LA ECUACIÓN GENERALIZADA DE RICCATI EN DERIVADAS PARCIALES. APLICACIÓN AL CONTROL DE REACCIONES ELECTROQUÍMICAS.

Marta Bergallo^a, Vicente Costanza^b y Carlos Neuman^a

^a*Departamento de Matemática (FIQ), Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, 3000 Santa Fe, Argentina, {bergallo|ceneuman}@fiqus.unl.edu.ar**

^b*Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC), Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina, tsinoli@ceride.gov.ar*

Palabras clave: Ecuación de Hamilton-Jacobi-Bellmann, Reacciones electroquímicas del hidrógeno, Ecuación de Riccati generalizada, Regulación de procesos, Problema bilineal-cuadrático, Procesos no lineales.

Resumen. Se proponen y comparan soluciones al problema de mantener un sistema no lineal en equilibrio mediante una acción de control que optimiza un costo cuadrático durante un período de tiempo especificado. Se aplican los resultados al control de las llamadas “reacciones electroquímicas del hidrógeno”(HER). Se resuelve el problema bilineal-cuadrático con horizonte finito apelando a diversos métodos que conducen a la formulación de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (EDP) y sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias cuyas soluciones se aproximan numéricamente. Una solución aproximada de la EDP de Hamilton-Jacobi-Bellmann (HJB) asociada a este problema se obtiene mediante la expansión en serie de potencias de la función de valor. Se desarrolla un nuevo método para reducir considerablemente el almacenamiento de información y facilitar su complejo procesamiento en tiempo real. Este método se basa en la integración de una EDP de primer orden (RPDE) para la matriz generalizada de Riccati, que depende no solo del tiempo como en el problema clásico lineal-cuadrático, sino también del estado en que se encuentra el sistema. Este último método tiene algunas ventajas respecto del anterior, por ejemplo: (a) la RPDE provee la condición inicial para el coestado del sistema, o sea que transforma el problema de resolver las ecuaciones Hamiltonianas (HE), originalmente con condiciones de contorno, en otro de condiciones iniciales, lo que permite la integración de las HE en línea con el proceso; (b) el grado de aproximación al control óptimo depende del método utilizado para integrar la RPDE, y no de la cantidad de coeficientes guardados en la serie de potencia, en principio de infinitos términos, necesarios para la solución de la HJB; (c) permite utilizar toda la solución de la RPDE para tratar perturbaciones de distinta norma y duración, en reemplazo de la integración de las HE, reconocidamente inestables dada su estructura simpléctica. En el trabajo se comparan las siguientes tres alternativas para la regulación: (i) series de potencias para HJB; (ii) RPDE fuera de línea y HE en línea; (iii) RPDE fuera de línea y optimización en línea. Para alguno de los métodos se han desarrollado algoritmos numéricos especializados, que se comparan con la utilización de software matemático de uso corriente. También se ilustra el comportamiento de las soluciones frente a variaciones en los parámetros de diseño del costo cuadrático, especialmente de la penalización final.

*Parcialmente financiado por el sistema CAI+D de la Universidad Nacional del Litoral

1. INTRODUCCIÓN

El problema de control óptimo de sistemas no lineales carece de soluciones universales al estilo del problema del regulador lineal-cuadrático (LQR, ver [Sontag \(1990\)](#)). Las aproximaciones lineales de dichos sistemas son apropiadas solamente en un sentido local, y aún así no se puede garantizar que se respete una cierta tolerancia durante todo un intervalo de tiempo fijado *a priori*, y para todas las estrategias de control admisible. Es por eso que existe una línea de trabajo sobre aproximaciones bilineales, que resuelven algunas de las falencias de las lineales (ver [Sussmann \(1975\)](#); [Fliess \(1975\)](#); [Cebuhar y Costanza \(1984\)](#); [Krener \(1974\)](#)). En particular, el problema con costo cuadrático y horizonte finito ha recibido especial atención últimamente, puesto que admite una generalización del tratamiento clásico a través de ecuaciones diferenciales de Riccati (ver [Costanza \(1997\)](#); [Picó y Costanza \(2005\)](#)) En el contexto bilineal-cuadrático la ecuación de Riccati se torna en derivadas parciales. El tratamiento numérico de dicha ecuación es el tema central de este trabajo.

Una vez planteados los fundamentos matemáticos, se proponen y comparan soluciones al problema de mantener un sistema no lineal en equilibrio mediante una acción de control que optimiza un costo cuadrático durante un período de tiempo especificado. Se aplican los resultados al control de las llamadas “reacciones de evolución del hidrógeno”(HER). Estas reacciones están asociadas a la cinética de procesos electroquímicos productores o consumidores de hidrógeno. La producción de hidrógeno es cada vez más importante en la industria por varias razones conocidas, entre ellas la disminución de la contaminación ambiental, en la producción de energía a través de las llamadas “celdas de combustible”(fuel cells), en baterías especiales y otros dispositivos (ver [Hudson y Tsotsis \(1994\)](#)). Una formulación aceptada de HER se expresa en el modelo de Volmer-Heyrovsky-Tafel (VHT) que se describe en la sección 2, ver [Costanza \(2005b,a\)](#). La dinámica del sistema es altamente no lineal, y dada su aplicación en celdas de combustible, baterías especiales, y dispositivos similares, la estabilización ante perturbaciones adquiere importancia tecnológica.

Para regular los sistemas no lineales se adopta una aproximación bilineal de baja dimensión, y se resuelve el problema bilineal-cuadrático con horizonte finito apelando a diversos métodos que conducen a la formulación de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (EDP) y sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, cuyas soluciones se aproximan numéricamente. Una solución aproximada de la EDP de Hamilton-Jacobi-Bellmann (HJB) asociada a este problema se obtiene mediante la expansión en serie de potencias de la función de valor, lo que conduce a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias para los coeficientes de dicha serie, que deben ser evaluados en tiempo revertido, fuera de línea; y sus valores archivados en la memoria del controlador para ser utilizados luego, en tiempo real, en la construcción del control de realimentación óptimo. Se desarrolla un nuevo método para reducir considerablemente el almacenamiento de información y facilitar su complejo procesamiento en tiempo real. Este método se basa en la integración de una EDP de primer orden (RPDE) para la matriz generalizada de Riccati, que depende no solo del tiempo como en el problema clásico lineal-cuadrático, sino también del estado en que se encuentra el sistema. Este último método tiene algunas ventajas respecto del anterior, por ejemplo:

- (a) la RPDE provee la condición inicial para el coestado del sistema, o sea que transforma el problema de resolver las ecuaciones Hamiltonianas (HE), originalmente con condiciones de contorno, en otro de condiciones iniciales, lo que permite la integración de las HE en línea con el proceso;
- (b) el grado de aproximación al control óptimo depende del método utilizado para integrar la

RPDE, y no de la cantidad de coeficientes guardados en la serie de potencia, en principio de infinitos términos, necesarios para la solución de la HJB;

- (c) permite utilizar toda la solución de la RPDE para tratar perturbaciones de distinta norma y duración, en reemplazo de la integración de las HE, reconocidamente inestables dada su estructura simpléctica.

En la sección 4, y en particular en 4.5, se comparan las siguientes tres alternativas para la regulación:

1. series de potencias para HJB;
2. RPDE fuera de línea y HE en línea;
3. RPDE fuera de línea y optimización en línea.

Para alguno de los métodos se han desarrollado algoritmos numéricos especializados, que se comparan con la utilización de software matemático de uso corriente.

En la sección 2, se presenta el problema HER-VHT y se le aplican los métodos explicados en el resto del trabajo. En la siguiente sección se analiza la formulación del control de sistemas no lineales y su bilinealización, y se establecen las HE y RPDE. A continuación se estudian distintos métodos de solución de las ecuaciones obtenidas y se aplican al caso de un sistema inestable. Por último se establecen conclusiones del trabajo.

2. PROBLEMA DE LAS REACCIONES DE EVOLUCIÓN HIDRÓGENO

El caso testigo de aplicación es la regulación del problema HER, que está asociado a procesos productores o consumidores de hidrógeno. Una formulación aceptada de HER se expresa en el modelo de Volmer-Heyrovsky-Tafel. La dinámica de los sistemas HER es no lineal (presentan comportamiento oscilante, ciclos de histéresis, multiestabilidad, atractores extraños y caos). Para los problemas de regulación, que presentan carácter local, es posible aproximar la dinámica de estos sistemas mediante modelos bilineales que tienen ventajas sobre la regulación clásica basada en aproximaciones lineales (lo que justifica la necesidad de las secciones posteriores donde se obtienen las ecuaciones básicas (RPDE, HE, desarrollo en potencias de HJB)).

Los pasos de Volmer-Heyrovsky-Tafel (VHT) son

$$\begin{aligned}
 v_V &= v_V^e \left[\frac{1-\theta}{1-\theta_e} \exp(-(1-\alpha)f\eta) - \frac{\theta}{\theta_e} \exp(\alpha f\eta) \right] && \text{(Volmer)} \\
 v_H &= v_H^e \left[\frac{\theta}{\theta_e} \exp(-(1-\alpha)f\eta) - \frac{1-\theta}{1-\theta_e} \exp(\alpha f\eta) \right] && \text{(Heyrovsky)} \\
 v_T &= v_T^e \left[\left(\frac{\theta}{\theta_e} \right)^2 - \left(\frac{1-\theta}{1-\theta_e} \right)^2 \right] && \text{(Tafel)}
 \end{aligned} \tag{1}$$

donde

θ es la fracción de la superficie del electrodo cubierta por hidrógeno atómico adsorbido

η es el sobrepotencial impuesto sobre el sistema para producir la reacción

v_V^e, v_H^e, v_T^e son las velocidades de reacción en equilibrio de cada paso

θ_e es el estado de equilibrio de θ

α es el factor simétrico de adsorción

R es la constante del gas (8,3145 J/mK)

F es la constante de Faraday (96484,6 Coulomb/md)

T es la temperatura absoluta (en este trabajo es 303,15 K)

f es igual a $F/(RT)$

Con todo ello, se tiene la ecuación correspondiente:

$$\dot{\theta} = \frac{F}{\sigma} (v_V - v_H - 2v_T) = g(\theta, \eta) \quad (2)$$

donde $\sigma = (2,21)^{-4}$ Coulomb/cm².

Se realiza una aproximación bilineal de la función g alrededor de un punto de equilibrio $(\bar{\theta}, \bar{\eta})$, resultando así una ecuación del estilo de (6), donde las constantes corresponden a $a = D_{\theta}g(\bar{\theta}, \bar{\eta})$, $b = D_{\eta}g(\bar{\theta}, \bar{\eta})$ y $n = D_{\theta, \eta}^2 g(\bar{\theta}, \bar{\eta})$.

En el ejemplo ilustrado a continuación, los valores de estos parámetros se resumen en la tabla 1.

Tabla 1: Parámetros del ejemplo del hidrógeno

$v_V^e = 1e-7$		$v_H^e = 1e-10$		$v_T^e = 1e-9$
$\theta_e = 0,1$		$\bar{\theta} = 0,38545805$		$\bar{\eta} = -0,05$
$a = -363,7724$		$q = 1,0$		$T = 0,02$
$b = -2,7141e+3$		$r = 1e+5$		$x_0 = 0,1$
$n = -770,1951$		$s = 1,0$		$P(x_0, 0) = 1,3725e-3$

Más información sobre sistemas HER puede encontrarse en, e.g. [Hudson y Tsotsis \(1994\)](#).

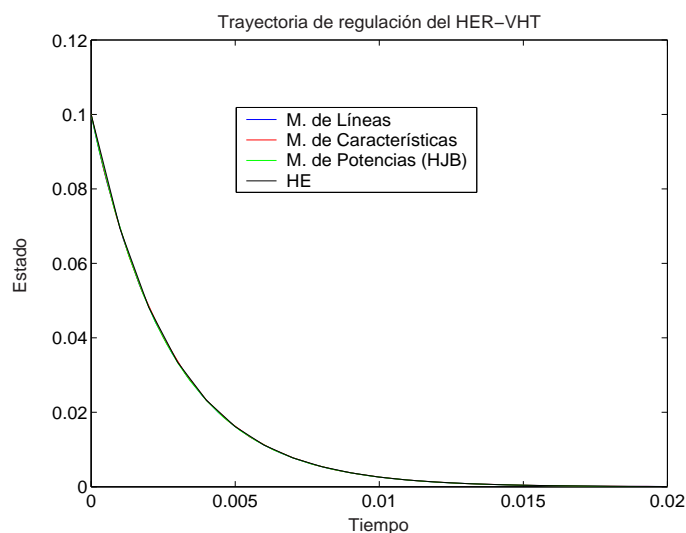


Figura 1: Trayectorias obtenidas por los distintos métodos desarrollados en las secciones posteriores. Todas ellas se superponen de modo que la curva “es” la trayectoria de regulación del sistema

En la figura 1 se representa el proceso de regulación al punto de equilibrio (que dada la bilinealización, se convierte en una regulación a cero). En la misma figura, se grafican las curvas correspondientes a todos los métodos desarrollados en este trabajo, notándose una coincidencia al nivel de los errores de integración numérica. En la figura 2 se representan las diferencias de

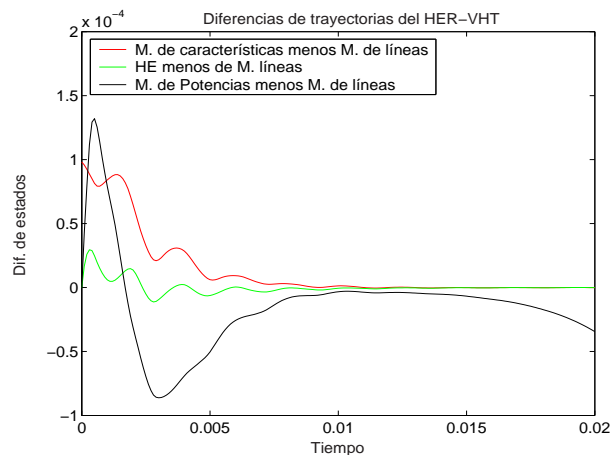


Figura 2: Diferencias de las trayectorias representadas en la figura 1

los otros métodos respecto del método de líneas, observándose que las mismas se encuentran comprendidas dentro del orden del error de aproximación. También se observa que en el sector donde la regulación ha llegado muy próxima a cero, los métodos de características y de HE prácticamente no difieren del método de líneas. Sin embargo, se nota una leve discrepancia con el método de potencias que podría resultar significativa dados los pequeños valores de los estados.

3. SISTEMAS NO LINEALES Y SU BILINEALIZACIÓN

El control de sistemas no lineales presenta dificultades metodológicas que llevan a la necesidad, en muchos casos, de modificar el sistema original con el fin de lograr su manipulación, control, regulación o seguimiento. El método que utilizamos aquí es el de aproximar el problema no lineal original mediante sistemas bilineales basados en desarrollos teóricos de aproximación de sistemas no lineales.

La clase de sistemas no lineales tiene la forma general

$$\begin{aligned}\dot{x} &= f(x, u) \\ x(0) &= x_0\end{aligned}\quad (3)$$

donde x representa el estado del sistema (en los casos que tratamos, unidimensional, identificado con la salida del mismo), u es la función de control que permite manipular los estados del sistema (también unidimensional) y la función f expresa la tasa de cambio del estado en función del tiempo.

El funcional correspondiente al costo asociado al control del sistema se puede expresar, de manera general

$$\mathcal{J}_T(x_0, t, u) = \int_t^T L(x, u) d\bar{t} + F(x(T)) \quad (4)$$

donde L y F son funciones que miden el costo instantáneo y final del proceso.

El objetivo es minimizar el costo \mathcal{J} eligiendo de manera conveniente el control u . Dicho de otra manera, se trata de determinar la función de valor

$$V(x, t) = \inf_u \mathcal{J}_T(x, t, u) \quad (5)$$

3.1. Bilinealización del sistema

En el entorno de cada punto de equilibrio (\bar{x}, \bar{u}) se puede realizar una aproximación bilineal del sistema (3)

$$\begin{aligned}\dot{x} &= a(x - \bar{x}) + b(u - \bar{u}) + n(x - \bar{x})(u - \bar{u}) \\ x(0) &= x_0\end{aligned}\quad (6)$$

donde $a = \frac{\partial f}{\partial x}(\bar{x}, \bar{u})$, $b = \frac{\partial f}{\partial u}(\bar{x}, \bar{u})$ y $n = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial u}(\bar{x}, \bar{u})$, el cual, haciendo un cambio de variables, resulta

$$\begin{aligned}\dot{x} &= ax + bu + nxu \\ x(0) &= \bar{x}_0\end{aligned}\quad (7)$$

donde $\bar{x}_0 = \bar{x} - x_0$. El funcional correspondiente al costo es, en este caso simplificado de manera cuadrática, de la forma

$$\mathcal{J} = \int_0^T (qx^2 + ru^2) dt + sx(T)^2 \quad (8)$$

donde q , r y s son los pesos relativos del estado, el control y el estado final y T es el tiempo final de evolución del proceso.

El Hamiltoniano correspondiente a este sistema bilineal tiene la forma

$$\mathcal{H}(x, u, \lambda) = qx^2 + ru^2 + \lambda [ax + (b + nx)u] \quad (9)$$

donde λ es la variable denominada coestado. A partir de la condición de regularidad del Hamiltoniano se deduce que el control óptimo, es decir el que minimiza \mathcal{H} , es $u^*(x, \lambda) = -\lambda(b + nx)/(2r)$. Luego, el valor óptimo del Hamiltoniano está dado por

$$\mathcal{H}^*(x, \lambda) = \mathcal{H}(x, u^*, \lambda) = qx^2 + \lambda ax - \frac{\lambda^2 (b + nx)^2}{4r}. \quad (10)$$

Es sabido (Sontag, 1990) que a lo largo de trayectorias óptimas $\lambda = V_x$, siendo V la función de valor definida en (5), a su vez solución de la ecuación de HJB:

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \mathcal{H}^*(x, V_x) = 0 \quad (11)$$

con la condición final $V(x, T) = sx(T)^2$.

3.2. Ecuaciones Hamiltonianas

A partir de la expresión de \mathcal{H}^* dada por (10) y de la que se obtiene al derivar respecto del estado la ecuación (11), resulta — para detalles de la deducción de las expresiones siguientes ver (Sontag, 1990), (Picó y Costanza, 2005)— el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{\partial \mathcal{H}^*}{\partial \lambda}; & x(0) = x_0 \\ \dot{\lambda} = -\frac{\partial \mathcal{H}^*}{\partial x}; & \lambda(T) = 2sx(T) \end{cases} \quad (12)$$

a las que haremos referencias como las Ecuaciones Hamiltonianas (HE).

Si bien las condiciones sobre las variables no son del mismo tipo, el problema se puede transformar, mediante un cambio de variables muy simple, en uno de valores iniciales. El mismo se puede integrar en línea con el proceso.

3.3. Coeficiente P de Riccati

En este caso bilineal que estamos considerando, se propone que el coestado sea $\lambda = 2P(x, t)x$, donde $P(x, t)$ debe ser determinada de modo tal que se satisfagan las HE. Esto conduce (Picó y Costanza, 2005) a la ecuación diferencial de Riccati (RPDE)

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial x} \left(a - \frac{(b + nx)^2}{r} P \right) x = -q - 2aP + \frac{(b + nx)(b + 2nx)}{r} P^2. \quad (13)$$

4. MÉTODOS NUMÉRICOS Y COMPARACIONES PARA PROBLEMAS INESTABLES

En esta sección presentamos distintos métodos para resolver el problema de determinar numéricamente aproximaciones a las trayectorias y controles óptimos para el sistema original y su posterior comparación sobre problemas inestables.

Los principales métodos utilizados son:

1. método de líneas para la determinación del coeficiente de Riccati de la RPDE con el objetivo de utilizarlo a posteriori en la construcción del control de regulación en la forma de realimentación (feedback);
2. método de las características que produce directamente las trayectorias óptimas y que se desarrolla con el objetivo de comparación con los restantes, puesto que, como queda definido por condiciones finales, debe ser integrado en tiempo revertido y en consecuencia no suele escogerse como método práctico, debido al problema de la determinación de la condición final para los estados;
3. sistema de ecuaciones hamiltonianas en el que las ecuaciones que originalmente forman un problema de condiciones de borde de dos puntos, pueden convertirse en un sistema de valores iniciales que es el que efectivamente se integra, como se explica más adelante;
4. método de potencias en el que se parte de la ecuación HJB (11) y se desarrolla en serie de potencias la función de valor V y se obtienen una serie de ecuaciones diferenciales ordinarias con especificación de condiciones finales en tiempo T , para un cierto número de coeficientes que permiten construir el control de realimentación para la regulación óptima.

4.1. Método de líneas

Este método fue implementado para resolver la ecuación diferencial de Riccati (13). El mismo consiste en resolver un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que quedan determinadas cuando se discretiza la variable estado. Concretamente, si particionamos el intervalo $[X_1, X_2]$ en N subintervalos de longitud Δx , quedan determinados nodos $x_i = i\Delta x$, para $0 \leq i \leq N$, donde los extremos X_i están elegidos de modo que el rectángulo $[0, T] \times [X_1, X_2]$ contenga a las trayectorias óptimas. Si llamamos $P_i(t) = P(x_i, t)$ siendo P la solución de (13),

reemplazando en esta última ecuación, resulta el siguiente sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{P}_i = -\frac{P_i - P_{i-1}}{\Delta x} \left[a - P_i \frac{(b + nx_i)^2}{r} \right] x_i \\ \quad \quad \quad -q - 2aP_i + \frac{P_i^2}{r} (b + nx_i)(b + 2nx_i) \\ P_i(T) = s, \quad \text{para } 0 \leq i \leq N \end{array} \right. \quad (14)$$

Este sistema está presentado en la forma de un problema de valores finales, el cual se integra con el tiempo revertido desde la condición final. Para este trabajo se utilizó un método de Runge–Kutta–Fehlberg de orden alto (pero se puede utilizar cualquier método equivalente) para resolver el sistema de ecuaciones (14).

4.2. Método de características

La ecuación RPDE (13) se puede reescribir de la siguiente manera:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + c_1(x, P) \frac{\partial P}{\partial x} = c_2(x, P) \quad (15)$$

donde

$$c_1(x, P) = \left(a - \frac{(b + nx)^2}{r} P \right) x \quad (16)$$

y

$$c_2(x, P) = -q - 2aP + \frac{(b + nx)(b + 2nx)}{r} P^2. \quad (17)$$

Esto permite plantear el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias para las características, con condiciones finales e integración en tiempo revertido, que producen directamente las trayectorias óptimas y los valores del coeficiente de Riccati sobre las mismas:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \dot{x} = c_1(x, P) & x(T) = x_T \\ \dot{P} = c_2(x, P) & P(T) = s \end{array} \right. \quad (18)$$

4.3. Ecuaciones hamiltonianas

Las ecuaciones Hamiltonianas HE, ecuación (12), se convierten, —derivando la ecuación (10) respecto de las variables λ y x , respectivamente, e incluyendo la condición inicial (que depende ahora del coeficiente de Riccati en el tiempo cero puesto que el valor de $\lambda(0)$ de la solución de la ecuación (12) corresponde al coeficiente mencionado),— en un sistema de valores iniciales regulado con el control óptimo de la forma

$$\left\{ \begin{array}{ll} \dot{x} = ax - \frac{((b + nx)^2)\lambda}{2r} & x(0) = x_0 \\ \dot{\lambda} = -2qx - a\lambda + \frac{(n\lambda^2(b + nx))}{2r} & \lambda(0) = P(x_0, 0) \end{array} \right. \quad (19)$$

4.4. Método de serie de potencias

El Hamiltoniano para el problema de regulación —que redefinimos, igualmente que otras expresiones que siguen, con leves modificaciones, por razones de completitud— se ha planteado (caso bilineal) así

$$H(x, u, \lambda, t) = H(x, u, \lambda) = qx^2 + ru^2 + \lambda[ax + (b + nx)u]. \quad (20)$$

Aquí la variable adjunta o coestado λ está asociada en la teoría de regulación al gradiente $\frac{\partial V}{\partial x}$ de la función de valor V definida mediante

$$V(x, t) = \inf_u J_T(x, t, u). \quad (21)$$

Este Hamiltoniano es regular y tiene un único extremo

$$u^*(x, \lambda) = -\frac{1}{2r}(b + nx)\lambda, \quad (22)$$

que no depende explícitamente de t .

Para Hamiltonianos regulares, resolver las HE es equivalente a resolver la ecuación de HJB

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \mathcal{H}^* \left(x, \left(\frac{\partial V}{\partial x} u^* \left(x, \frac{\partial V}{\partial x} \right) \right) \right) = 0, \quad (23)$$

con la condición de frontera final

$$V(x, T) = sx^2. \quad (24)$$

El problema de regulación para horizonte finito T permite proponer

$$V(x, t) = P_1(t)x^2 + P_2(t)x^3 + P_3(t)x^4 + P_4(t)x^5 + \dots \quad (25)$$

con lo cual queda

$$\frac{\partial V}{\partial x} = 2P(x, t)x, \quad (26)$$

con $P(x, t)$ una matriz simétrica (en general, pero en este caso de dimensión uno) que admite un expansión en serie de potencias

$$P(x, t) = P_1(t) + \frac{3}{2}P_2(t)x + 2P_3(t)x^2 + \frac{5}{2}P_4(t)x^3 + \dots \quad (27)$$

es decir que, de la ecuación (25),

$$\frac{\partial V}{\partial x} = 2P_1(t)x + 3P_2(t)x^2 + 4P_3(t)x^3 + 5P_4(t)x^4 + \dots \quad (28)$$

y

$$\frac{\partial V}{\partial t} = P_1'(t)x^2 + P_2'(t)x^3 + P_3'(t)x^4 + P_4'(t)x^5 + \dots \quad (29)$$

De la condición $V(x, T) = sx^2$ se obtienen las condiciones finales para las $P_i(T)$ que resultan todas nulas salvo $P_1(T) = s$.

De la expresión para la ecuación de HJB (23) efectuando los reemplazos pertinentes se obtiene el sistema de ecuaciones ordinarias para los P_i con valores finales siguiente:

$$P_1' = -q - 2aP_1 + \frac{b^2}{r}P_1^2 \quad (30)$$

$$P'_2 = -3aP_2 + \frac{b^2}{r}3P_1P_2 + \frac{2bn}{r}P_1^2 \quad (31)$$

$$P'_3 = -4aP_3 + \frac{1}{4r}(b^2(16P_1P_3 + 9P_2^2) + 2bn(12P_1P_2) + n^2(4P_1^2)) \quad (32)$$

$$P'_4 = -5aP_4 + \frac{1}{4r}(b^2(20P_1P_4 + 24P_2P_3) + 2bn(16P_1P_3 + 9P_2^2) + n^2(12P_1P_2)) \quad (33)$$

$$P'_5 = -6aP_5 + \frac{1}{4r}(b^2(24P_1P_5 + 30P_2P_4 + 16P_3^2) + 2bn(20P_1P_4 + 24P_2P_3) + n^2(16P_1P_3 + 9P_2^2)) \quad (34)$$

$$P'_6 = -7aP_6 + \frac{1}{4r}(b^2(28P_1P_6 + 36P_2P_5 + 40P_3P_4) + 2bn(24P_1P_5 + 30P_2P_4 + 16P_3^2) + n^2(20P_1P_4 + 24P_2P_3)) \quad (35)$$

En este caso se escriben las primeras seis ecuaciones (que son las que se usan efectivamente en los ejemplos) pero la construcción del control utilizando estos coeficientes puede hacerse tomando dos, tres, cuatro o más de ellos (en este caso utilizamos los seis)

4.5. Ejemplos de comparación entre los métodos

En esta sección consideramos ejemplos ilustrativos de las diferencias entre los distintos métodos utilizados. En los mismos los valores de los parámetros que definen un sistema en principio inestable, para el cual se va a aplicar los métodos de optimización bilineal cuadrática, se resumen en la tabla 2. El coeficiente de Riccati en tiempo cero $P(x_0, 0) = 5,8$ incluido

Tabla 2: Parámetros de los ejemplos para la comparación entre los distintos métodos

$a = 1,0$		$q = 1,0$		$T = 2,5$
$b = 0,5$		$r = 1,0$		$x_0 = 0,5$
$n = 0,5$		$s = 1,0$		$P(x_0, 0) = 5,8$

en la tabla se obtiene mediante el método de las características (lo que evita resolver las HE expresadas en la ecuación (12), ver figura 5)

4.5.1. Método de líneas

En la figura 3 se representa el coeficiente de Riccati en función del estado y del tiempo, en un rectángulo que contiene la trayectoria de regulación desde el valor inicial. El objetivo de calcular este coeficiente de Riccati es poder disponer de su valor para calcular el control de regulación del sistema en la forma de realimentación (*feedback*).

La integración del sistema de líneas (14) se realiza a tiempo revertido desde el tiempo final T hasta cero, dado que los valores del coeficiente de Riccati en el tiempo final, son conocidos.

La discretización de la derivada respecto del estado se realiza mediante una diferencia atrasada (en lugar de utilizar una diferencia centrada de orden de aproximación superior). El objetivo

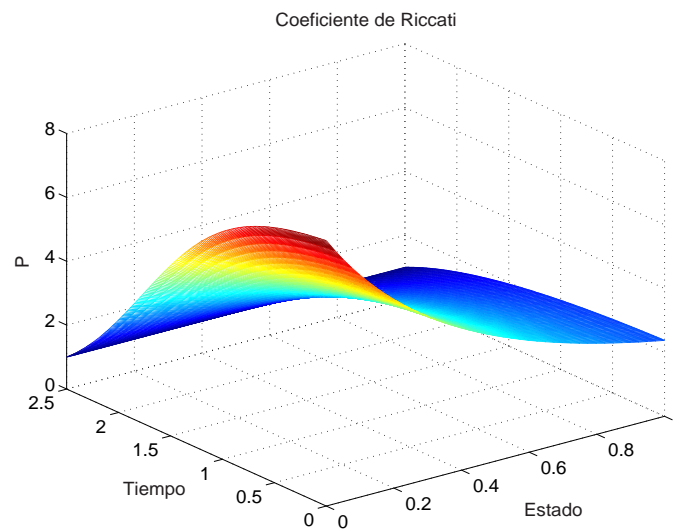


Figura 3: Coeficiente de Riccati. Método de líneas

de esta elección es aprovechar la expresión discretizada en el borde del rectángulo correspondiente al estado nulo.

Mediante reformulación algebraica de la RPDE es posible obtener el coeficiente de Riccati utilizando las funciones estándar de la caja de herramientas de EDP de Matlab, reproduciendo los valores que se representan en la figura 3.

4.5.2. Método de características

En este método se integran las ecuaciones (15), (16) y (17) a tiempo revertido para distintos valores del estado final con el fin de obtener un haz de características, las que a su vez son, por su construcción, trayectorias óptimas.

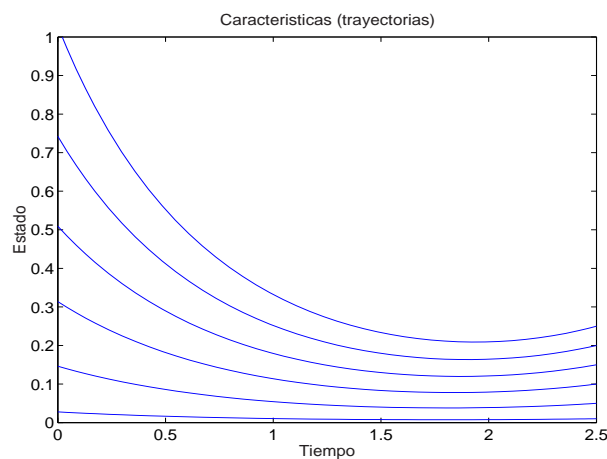


Figura 4: Trayectorias (características)

En las figuras 4 y 5 se representa el resultado de la integración del sistema previo de dos maneras diferentes. En la primera se grafica el haz de trayectorias (controladas) que pueden interpretarse como las curvas que seguiría el sistema para las respectivas condiciones a tiempo cero. En la segunda figura se adiciona a lo anterior la representación del coeficiente de Riccati correspondiente a cada punto de la característica asociada.

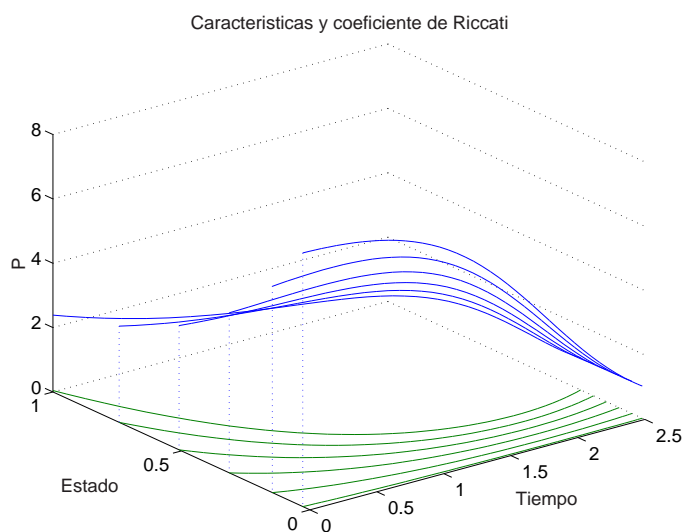


Figura 5: Coeficiente de Riccati y trayectorias correspondientes

De la comparación de las figuras 5 y 3, se puede apreciar la coincidencia de los valores del coeficiente de Riccati en la zona común al haz de las características y el rectángulo correspondiente al método de líneas. Puede inferirse que de haber continuado el cálculo de las restantes características del dominio, la alta similitud se mantendría.

A partir de la determinación de las curvas características se obtiene el coeficiente de Riccati en tiempo cero, que es necesario para integrar las HE con condiciones iniciales.

En la sección 4.5.5 el cálculo de las características adquiere importancia dado que allí se verifica la compatibilidad entre los distintos métodos en lo que se refiere al cálculo del coeficiente de Riccati (ver figura 9), incluido el caso de la solución de la ecuación algebraica de Riccati, válida para el caso lineal y de horizonte infinito.

4.5.3. Método de potencias

En la figura 6(a) se dibujan los valores de los coeficientes de la serie de potencias que se utilizan para la construcción del control de regulación a través del cálculo de V_x (ver las expresiones (30-35) y asociadas) Resultan casi constantes en el intervalo de análisis. Pero este comportamiento no es el más habitual, ya que en general tienen una variación significativa en función del tiempo.

Cabe recordar que este sistema de coeficientes se integra en tiempo revertido y se acumula en la memoria para su uso posterior.

En la figura 6(b) se observa la calidad del ajuste a cero (de orden superior a $1e - 10$) de la ecuación HJB con sólo seis coeficientes en la serie de potencias.

En la figura 7 representamos las trayectorias de regulación por el método de serie de Potencias y el coeficiente de Riccati (HJB) que se calcula mediante la serie que está asociado a cada una. El objetivo de esta figura es de comparación con las figuras 5 y 3.

4.5.4. Comparación entre los métodos de líneas y potencias

En las figuras 8(a) y 8(b) se comparan las trayectorias, costos y controles calculados mediante los métodos de líneas y de potencias.

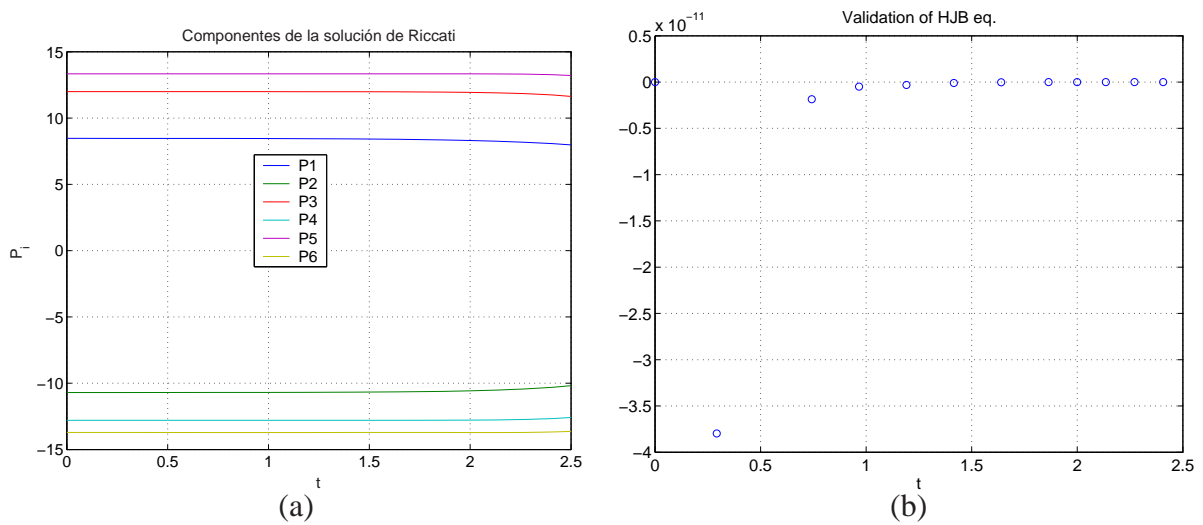


Figura 6: (a) Componentes de la expresión en serie de potencias para la ecuación de HJB, (b) Validación de la ecuación de Riccati

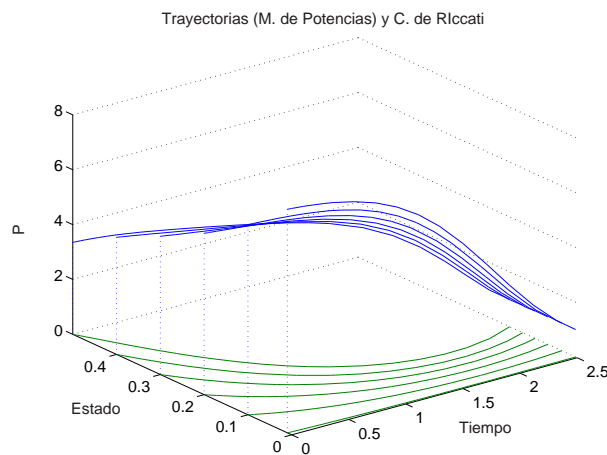


Figura 7: Trayectorias de regulación por el método de serie de Potencias y el coeficiente de Riccati (HJB) asociado a cada una. Comparar con las figuras 5 y 3

Ambos métodos son muy similares notándose que la trayectoria correspondiente al método de líneas comienza con pendiente menor (mayor en valor absoluto) que la del método de potencias. Asociado a ello se tienen las correspondientes diferencias en costos acumulados y controles. En el caso de estos últimos, el menor valor inicial del control en el caso del método de líneas, que provoca el efecto antes mencionado, se compensa con el hecho de ser constantemente mayor a partir del punto de intersección de las curvas. El costo final resulta levemente menor en el método de líneas.

4.5.5. Comparación de coeficientes de Riccati en tiempo cero

En la figura 9 se representan los coeficientes de Riccati en tiempo 0 (métodos de líneas y características) para tiempos finales de evolución del sistema, T , crecientes. Las curvas del método de líneas y los valores coincidentes seleccionados (asteriscos) provenientes del método de características se comparan con la solución de la ecuación de Riccati algebraica (tiempo

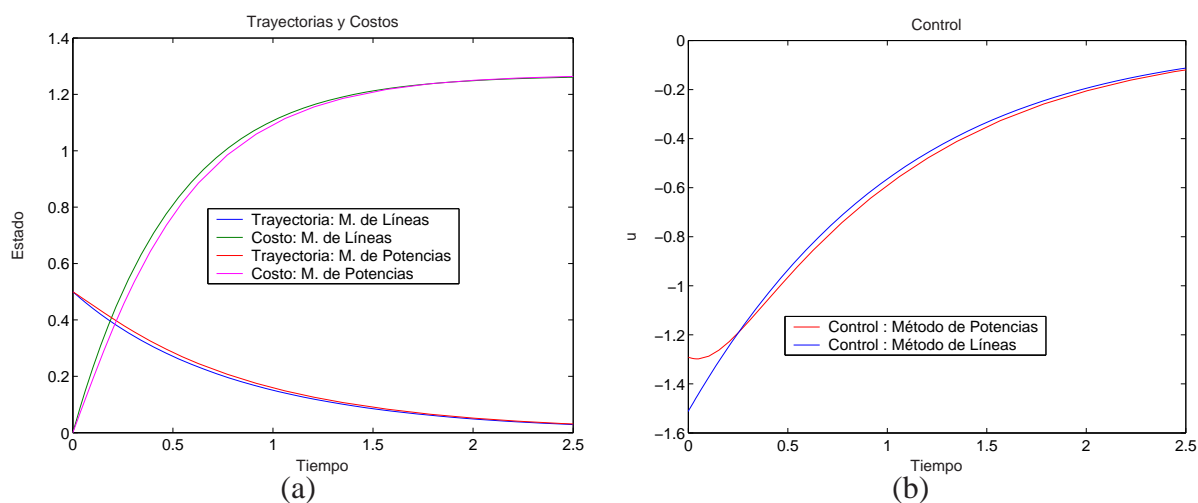


Figura 8: (a) Trayectorias y costos. Métodos de líneas y potencias, (b) Controles

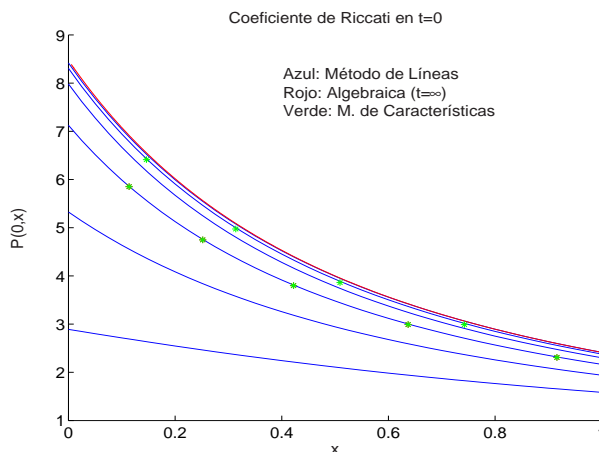


Figura 9: Coeficiente de Riccati en tiempo 0 (métodos de líneas y características) y comparación con solución de la ecuación de Riccati algebraica (tiempo infinito)

infinito) que en este caso bilineal resulta ser

$$2aP - \frac{(b + nx)^2}{r} P^2 + q = 0, \tag{36}$$

observándose que convergen a la misma a medida que T crece.

Cabe destacar que en estos problemas de regulación óptima, el comportamiento para tiempos finales breves se aproxima rápidamente al correspondiente a tiempo cuasi infinito.

Las curvas de coeficientes de Riccati en tiempo cero obtenidas con el método de líneas se superponen en algunos puntos (asteriscos) con los correspondientes coeficientes calculados con el método de características para los mismos tiempos finales en cada caso (ver figura 5 donde se representan, en particular, algunos de estos $P(x, 0)$ para $T = 2,5$).

4.5.6. Trayectorias de regulación con los diferentes métodos

En la figura 10 se comparan las trayectorias de regulación utilizando todos los métodos descriptos previamente. Los costos relativos de esta regulación son todos similares, levemente

superiores a $\mathcal{J}_{2,5} = 1,26$, siendo levemente inferior el correspondiente al método de líneas.

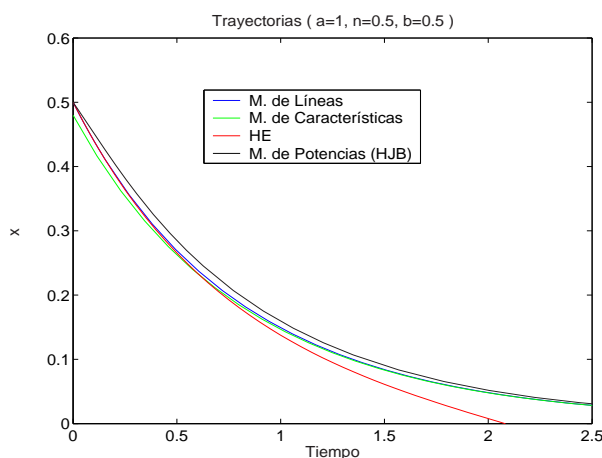


Figura 10: Trayectorias con los diferentes métodos

5. CONCLUSIONES

En las secciones previas se han desarrollado y comparado métodos numéricos para resolver la ecuación generalizada de Riccati (RPDE) en derivadas parciales. La matriz resultante $P(x, t)$ permite calcular la condición inicial para el coestado λ del sistema, o sea que transforma el problema de resolver las ecuaciones Hamiltonianas, originalmente diferenciales ordinarias con condiciones de contorno, en otro de condiciones iniciales. Esto hace posible que las ecuaciones Hamiltonianas (ordinarias) puedan integrarse en línea con el proceso, suministrando los valores del estado y del coestado necesarios para evaluar el control óptimo, prácticamente en cada instante. En realidad, si se admite cierta tolerancia en los errores de interpolación, los valores obtenidos para $P(x, t)$ pueden utilizarse directamente para calcular el control óptimo en forma de feedback como $u^*(t) = -((b + nx(t))/r)P(x(t), t)x(t)$. Los valores de control calculados por distintos métodos han sido utilizados para determinar el grado de aproximación a la optimalidad que se logra con cada uno de ellos.

Se ha tomado como caso de aplicación el complejo de reacciones de evolución del hidrógeno presentes en ciertos dispositivos electroquímicos, las celdas de combustibles entre los más notorios. La regulación de estos sistemas, de potencial uso para la generación masiva de energía, merece ser tratado como problema de optimización económica. De allí que los resultados tendientes a calcular controles óptimos sean aplicables a esta situación, como así también las informaciones adicionales que brinda la solución de la RPDE. Por ejemplo, la rapidez en calcular la solución permite evaluar la influencia de la penalización final s sobre el “costo marginal” $\lambda(0) = V_x(x, 0)$, y a partir de ello seleccionar el estado de equilibrio más conveniente para mantener la operación del sistema en estado estacionario.

El llamado “método de líneas” presentó ventajas sobre los restantes. Por atacar todo el recinto (x, t) de interés al mismo tiempo, mejora sustancialmente la velocidad con respecto al “método de características”, que requiere numerosas integraciones de ecuaciones diferenciales ordinarias, y un complicado ensamblaje posterior de las trayectorias obtenidas. En materia de precisión de resultados, el método de líneas demostró superioridad sobre el método de series de potencias, puesto que éste último necesita calcular un número grande de coeficientes variables en el tiempo, extraíbles a través de la integración de ecuaciones no lineales acopladas. La

complejidad de las ecuaciones diferenciales asociadas a dichos coeficientes hace que el error de integración sobrepase la mejora teóricamente obtenible por el agregado de nuevos términos de la serie aproximante.

Los valores calculados a partir de la ecuación en derivadas parciales son más confiables cerca del equilibrio que los resultantes de la integración de las ordinarias Hamiltonianas, puesto que estas últimas poseen una inestabilidad inherente a su estructura simpléctica (la mitad de los autovalores de su linealización tienen siempre parte real no negativa).

REFERENCIAS

- W. Cebuhar y V. Costanza. Approximation procedures for the optimal control of bilinear and nonlinear systems. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 43:615–627, 1984.
- V. Costanza. Set-point changes in optimal regulation problems. *Latin American Applied Research*, 27:91–97, 1997.
- V. Costanza. Optimal state-feedback regulation of the hydrogen evolution reactions. *Latin American Applied Research*, 35:327–335, 2005a.
- V. Costanza. A variational approach to the control of electrochemical hydrogen reactions. *Chemical Engineering Science*, 60:3703–3713, 2005b.
- M. Fliess. Séries de Volterra et séries formelles non commutatives. *Comptes Rendus Académie des Sciences, Paris*, 280:965–967, 1975.
- J.L. Hudson y T.T. Tsotsis. Electrochemical reaction dynamics: A review. *Chemical Engineering Science*, 49:1493–1572, 1994.
- A.J. Krener. Linearization and bilinearization of control systems. *Proceedings Allerton Conference on Circuits and System Theory, Urbana (IL)*, 1:834–843, 1974.
- M. F. Picó y V. Costanza. Control hamiltoniano de sistemas no lineales en tiempo real. *Proceedings XI RPIC05*, 1:1–6, 2005.
- E.D. Sontag. *Mathematical Control Theory*. Springer, New York, 1990.
- H.J. Sussmann. Semigroup representations, bilinear approximations of input-output maps, and generalized inputs. *Springer Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems*, 131: 172–192, 1975.