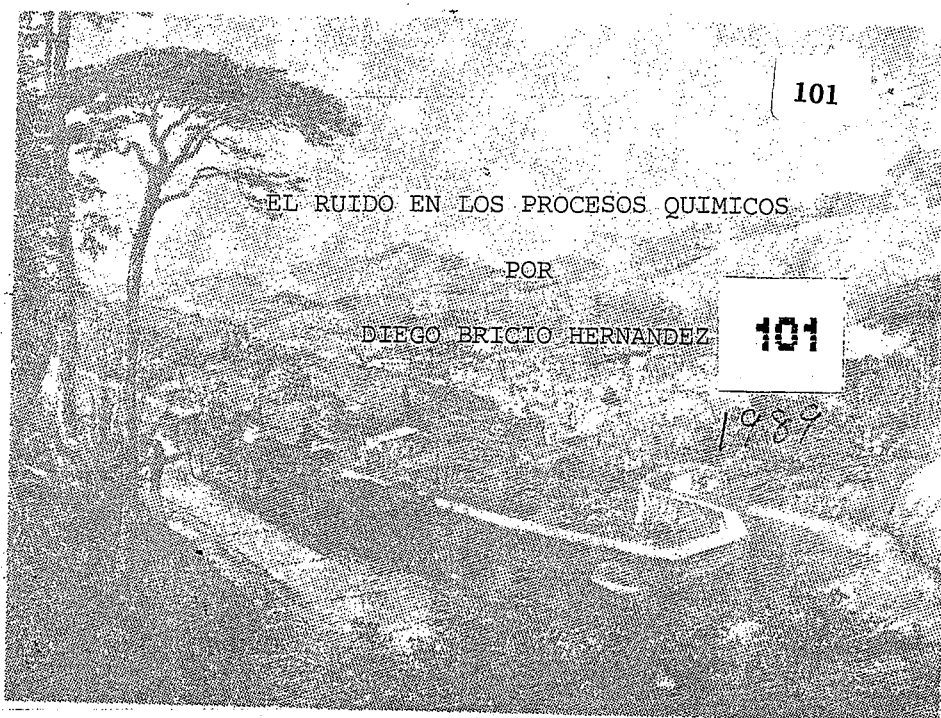


COMUNICACIONES DEL CIMAT



**CENTRO DE
INVESTIGACION EN
MATEMATICAS**

Apartado Postal 402

Guanajuato, Gto.

México

Tels. (473) 2-25-50

2-02-58

EL RUIDO EN LOS PROCESOS QUIMICOS*

por

DIEGO BRICIO HERNANDEZ

CIMAT

Apartado Postal 402
36000-Guanajuato, Gto.
M E X I C O

Resumen

Se ofrece el punto de vista de que no es realista suponer condiciones estacionarias al modelar un proceso químico, ya que hay multitud de variables que no se toman en cuenta al modelar y en consecuencia se introducen variabilidades de diverso género. A menudo las variabilidades en cuestión se manifiestan erráticas, como perturbaciones de poca amplitud pero alta frecuencia, resultado de la superposición de un gran número de pequeños efectos. En esos casos es posible substituir un gran número de variables "rápidas" mediante un pequeño número de términos aleatorios, es decir, mediante ruido. Esto supone una reducción en la dimensión del modelo, y por ende una simplificación del mismo. Se dan algunos ejemplos de lo anterior y se expone una metodología para sistematizar este tipo de construcciones.

1. El regimen permanente

Tipicamente, las plantas químicas se diseñan para funcionar bajo condiciones estacionarias (o régimen permanente), aún cuando se reconoce la presencia de regímenes transitorios, principalmente durante los encendidos y apagados de las mismas. Se sabe que hay muchos factores externos que tienden a sacarlas de las condiciones deseadas de operación, y por ello se dotan de controladores que contrarresten dicha tendencia. En vista de lo anterior, puede argumentarse que el problema básico de la Ingeniería Química es el diseño de plantas industriales que efectivamente funcionen bajo las condiciones estacionarias deseadas. Desde el punto de vista de

* Ponencia presentada en el Taller de Matemáticas en Ingeniería Química (VI Coloquio del Departamento de Matemáticas del CINVESTAV), Oaxtepec, Mor., 3-4 de Agosto de 1989.

la Ingeniería de Control, el problema básico a resolver es el de *regulación*.

Ahora bien, el componente central de un proceso químico es el reactor, en el que se da la transformación de las materias primas en el producto deseado. Antes del reactor, las materias primas se someten a diversos procesos de separación, con objeto de purificarlas; se transportan, típicamente en forma fluida y reciben o ceden calor. Después del reactor, los productos de la reacción se purifican, se transportan, se calientan o se enfrían. Una vez diseñado el proceso, sus diferentes componentes se deben diseñar también, para funcionar a condiciones de operación prefijadas.

Los reactores químicos pueden ser de varios tipos, y pueden funcionar bien sea en forma *intermitente* (también llamada *por lotes*) o *continua*. Atendiendo a su forma geométrica, los tipos más frecuentes son los *tubulares* y los *de tanque agitado*, aunque hay también reactores de *rejilla* y otros. Desde otro punto de vista, los reactores pueden ser *catalíticos* o no, según que la transformación química deseada se induzca o no mediante un catalizador. También pueden clasificarse en *homogéneos* o *heterogéneos*, según que las transformaciones químicas tengan lugar en una o varias fases. Véase el libro [Kramers-Westerterp, 1963] para mayor información sobre los diferentes tipos de reactores que se utilizan en los procesos químicos.

En lo que sigue utilizaremos un modelo matemático de un reactor continuo de tanque agitado (RCTA, o CSTR, según se abrevia en lengua inglesa) para ilustrar los conceptos pertinentes al ruido en los procesos químicos. Es el tipo de reactor más sencillo de describir, y por eso lo hemos elegido; también podríamos habernos valido de cualquier otro componente del proceso para ilustrar estas ideas, pero nuestra elección ha recaído en el reactor por simples preferencias personales.

Para simplificar la descripción del RCTA, supondremos que la operación del mismo es isotérmica. Ciertamente supondremos también

que la agitación de la mezcla reaccionante es perfecta, por lo que su composición química es homogénea. Además, supondremos que no hay cambios de volumen V durante la reacción, y que el reactivo principal A se alimenta al tanque agitado diluido en una corriente fluida de caudal q_A y concentración C_{A0} y se extrae el remanente en la corriente de salida, de caudal q . Finalmente, supondremos que la reacción que se da en el reactor, a saber



tiene cinética conocida, dada por $r(C_A) :=$ tasa de consumo del reactivo A por unidad de volumen, cuando su concentración es C_A . La constancia del volumen V requiere que el reactivo B se alimente por separado, en una corriente con caudal $q - q_A$. Todas las magnitudes anteriores se miden en unidades molares en el sistema CGS, y el tiempo t se medirá en segundos.

Sea $t \mapsto C_A(t)$ la trayectoria de la concentración de reactivo principal, función que supondremos es continuamente diferenciable. De un sencillo balance de materia se obtiene que dicha función satisface la ecuación diferencial ordinaria

$$V \frac{dC_A}{dt} = q_A C_{A0} - q C_A - V r(C_A) \quad (2)$$

Si relajáramos la hipótesis de isotermicidad en la operación del reactor, de un balance de energía resultaría una segunda ecuación diferencial ordinaria, cuya solución sería la trayectoria de la temperatura, $t \mapsto T(t)$; ambas ecuaciones diferenciales estarían acopladas mediante el término cinético, que sería $r(C_A, T)$. Si en lugar de una sola reacción como en (1) ocurrieran varias reacciones, deberíamos plantear más de una ecuación diferencial de balance de materia (2), por lo que aún en el caso isotérmico obtendríamos un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias como modelo matemático del RCTA.

Así pues, vemos que los equipos de este tipo se pueden modelar mediante sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias del tipo

$$\dot{x} = f(x), \quad (3)$$

donde $x(t) \in \mathbb{R}^n$ y $f: D \rightarrow \mathbb{R}^n$ es continuamente diferenciable, con D un

dominio en \mathbb{R}^n . Lo mismo se vale para equipos de separación como columnas de destilación por platos y muchos otros, por lo que el modelo general (3) es de bastante interés. Ciertamente no es universal, pues basta relajar la hipótesis de mezclado perfecto en el tanque para que sea necesario recurrir a un sistema de ecuaciones en derivadas parciales; lo mismo si el reactor fuera tubular, o si se tratara de una operación de separación que no se efectuara por etapas. Sin embargo, para nuestros fines (3) será un modelo suficientemente general: un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, que representarán balances de materia o de energía.

Según lo dicho antes, el problema básico es el de mantener la operación a régimen permanente, en un estado estacionario deseado. Dicho estado está representado mediante una solución $\bar{x} \in D$ del sistema de ecuaciones algebraicas

$$f(\bar{x}) = 0, \quad (4)$$

de las que podrá haber más de una si f no es lineal. Sea la traslación $x \mapsto u$ de \mathbb{R}^n , dada por $u := x - \bar{x}$, y transformemos (3) a las nuevas coordenadas, obteniendo así

$$\dot{u} = f(\bar{x} + u) = f(\bar{x}) + f'(\bar{x})u + \eta(\bar{x}, u)$$

en virtud de la diferenciabilidad de f , donde

$$\frac{\eta(\bar{x}, u)}{\|u\|} \rightarrow 0 \text{ cuando } \|u\| \rightarrow 0.$$

Si $A := f'(\bar{x}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, resulta de (4) que, en las nuevas coordenadas,

$$\dot{u} = Au + \eta. \quad (5)$$

El modelo linealizado en torno al estado estacionario \bar{x} correspondiente a (3) no es otro que el sistema lineal

$$\dot{u} = Au, \quad (6)$$

donde A es la matriz jacobiana de f calculada precisamente en \bar{x} . Un resultado clave en la teoría de ecuaciones diferenciales ordinarias es el llamado Primer Teorema de Liapunoff [Bellman, 1953, Cap. 4], según el cual si todos los valores propios de A tienen parte real negativa (es decir si A es estable), entonces la solución de equilibrio en cuestión es asintóticamente

estable.

En términos ingenieriles, esta afirmación equivale a decir que si todos los valores propios de A tienen parte real negativa, entonces el régimen permanente efectivamente se mantiene, al menos bajo perturbaciones pequeñas. Huelga decir cuan tranquilizadora resulta esta afirmación para quien se interese en mantener unas condiciones de operación preespecificadas.

Sin embargo, ¿en la práctica se logra mantener en verdad constantes las condiciones de operación? Ciertamente se mantienen dentro de cierto rango, pero no constantes: cualquiera que haya visto un registro temporal de una variable de proceso habrá notado que se producen oscilaciones irregulares de baja amplitud en torno al valor nominal de la misma. Por ejemplo, un registro temporal de temperatura tendrá una forma semejante a la Fig. 1, que muestra perturbaciones de baja amplitud y alta frecuencia en torno al valor nominal \bar{T} .

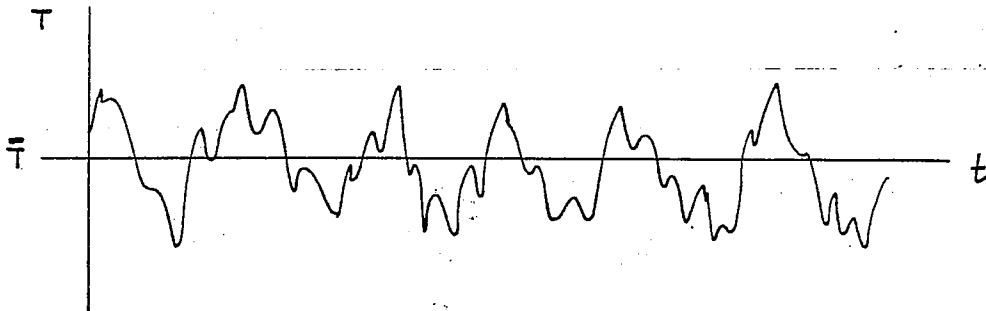


Fig: 1 Registro temporal de temperatura en un proceso

Esto indica que la linealización en torno a un estado estacionario se justifica a posteriori, pues las perturbaciones son pequeñas. Sin embargo, si se desea tomar en cuenta las perturbaciones observadas más valdría retener el término η de (5) en lugar de pasar a (6). Llevado a sus últimas consecuencias, esto equivale a trabajar con el modelo no lineal (3). Veamos en las siguientes secciones una alternativa intermedia.

2. El ruido en los sistemas lineales

El tipo de perturbaciones observadas en la práctica indican que los modelos sencillos como (1.3) no toman en cuenta la

variabilidad de las variables de proceso, que a menudo resulta difícil de eliminar. En efecto, hay que tomar en cuenta que al reactor en cuestión se alimentan corrientes que vienen de otras partes de la planta, sujetas a influencias quizá fuera de nuestro control.

Por ejemplo, la tasa de alimentación de A al reactor es $q_A C_{AO}$, que hemos supuesto constante; sin embargo, si la midiéramos y luego graficáramos el registro temporal correspondiente, lo más seguro es que tendría un comportamiento semejante al de la temperatura en la Fig. 1.1. Así pues, no sólo no es constante, sino que su comportamiento es más bien irregular, algo errático. Veamos qué consecuencia tiene sobre el modelo el tomar en cuenta estas variaciones.

Para ello, comencemos por denotar por \bar{q}_A y \bar{C}_{AO} los valores nominales de estas cantidades, y por $q_A(t)$ y $C_{AO}(t)$ sus valores en función del tiempo. Definamos la variación relativa en la alimentación de A al reactor, adecuadamente normalizada, mediante

$$u(t) := \frac{q_A(t)C_{AO}(t) - \bar{q}_A \bar{C}_{AO}}{a \bar{q}_A \bar{C}_{AO}}$$

donde a es una constante positiva que se introduce como factor de normalización. Así pues,

$$q_A(t)C_{AO}(t) = \bar{q}_A \bar{C}_{AO} (1 + au(t)),$$

que substituida en (1.2) da lugar al modelo dinámico

$$V \frac{dC_A}{dt} = \bar{q}_A \bar{C}_{AO} - q_A C_A - Vr(C_A) + a \bar{q}_A \bar{C}_{AO} u(t).$$

Por otro lado, en el estado estacionario (necesariamente teórico), $u=0$ y

$$0 = \bar{q}_A \bar{C}_{AO} - q_A \bar{C}_A - Vr(\bar{C}_A).$$

Basta restar esta última relación de la inmediatamente precedente y definir la variable desviación $x := C_A - \bar{C}_A$ para obtener en las nuevas coordenadas la ecuación diferencial

$$\dot{x} = -\frac{1}{\tau}x - \psi(x) + \sigma u(t), \quad (1)$$

donde

$$\tau := V/q, \quad \sigma := a\bar{q}_A\bar{C}_{A0}, \quad \psi(x) := r(\bar{C}_{A0} + x) - r(\bar{C}_{A0}).$$

Esta última ecuación diferencial corresponde a (1.3) con ruido aditivo. Linealizando ψ en torno al estado estacionario $x=0$, se obtiene de (1) la versión

$$\dot{x} = -\lambda x + \sigma u(t), \quad (2a)$$

donde

$$\lambda := \frac{1}{\tau} - \psi'(0). \quad (2b)$$

En ausencia de perturbaciones (cuando $u = 0$), el estado estacionario $x = 0$ será asintóticamente estable si $\lambda > 0$. En general, el comportamiento dinámico de este sistema lineal estará dado por la naturaleza de la perturbación u .

Supongamos por un momento que u es una función continua. Dado que $\sigma > 0$, el sistema (1) es completamente controlable [Brockett, 1970], por lo que cualquier estado x se puede alcanzar a partir de cualquier estado inicial $x(0)$ en un tiempo finito T , con sólo especificar adecuadamente $u(s)$, $0 \leq s \leq T$. De hecho, la solución de (2) correspondiente a una condición inicial dada $x(0)$ es

$$x(t) = e^{-\lambda t}x(0) + \sigma \int_0^t e^{-\lambda(t-s)}u(s)ds, \quad t \geq 0. \quad (3)$$

En otras palabras, basta que sean suficientemente grandes las perturbaciones a la entrada del reactor para que se exceda cualquier nivel de tolerancia en cuanto al mantenimiento del estado estacionario. Vemos pues que no es obvio que se alcanzará el régimen permanente deseado.

Por otro lado, la experiencia indica lo poco predecibles que son las perturbaciones respecto a su valor nominal observadas en las variables de proceso. En nuestro caso, es dable suponer que tengan trayectorias continuas, pero cual de todas las posibles trayectorias será observada es algo que a priori no se puede decir. Una posible manera de tratar estas situaciones ha sido utilizada en la Física Estadística desde hace mucho tiempo: se

considera que las perturbaciones observadas son realizaciones de un proceso estocástico $\{u(t), t \geq 0\}$, el cual se describe en términos de su media y su autocorrelación.

Recordemos que la media de un tal proceso es la función $m(t) := E u(t)$, donde $E X$ denota el valor esperado de la variable aleatoria X . Si $m = 0$, se dice que el proceso estocástico es centrado. A su vez, la función de autocorrelación de $\{u(t), t \geq 0\}$ se define como

$$C_u(t, s) := E\{u(t) - m(t)\}\{u(s) - m(s)\},$$

y en general es función de dos variables, los instantes s y t considerados. La función $t \rightarrow C_u(t, t)$ se conoce como *varianza* del proceso en cuestión.

Si la función de autocorrelación de un proceso estocástico sólo depende de la diferencia $t-s$, se dirá que el proceso es *estacionario* (o, más bien, *debilmente estacionario*). En este caso se acostumbra escribir $C_u(t-s)$ en lugar de $C_u(t, s)$. Ya hemos tratado estas cuestiones en [Hernández, 1987a], trabajo al que referimos a los lectores para mayores detalles.

De hecho, el modelo (1) no es sino la ecuación de Langevin investigada por ejemplo en [Uhlenbeck-Ornstein, 1930] bajo las siguientes suposiciones:

A) El proceso $\{u(t), t \geq 0\}$ es estacionario, y

B) Su autocorrelación $C(\tau)$ "presenta un pico muy pronunciado en $\tau=0$ ".

Posteriormente (véase [Doob, 1942]), la ecuación de Langevin (1) fue investigada rigurosamente por Doob, para lo cual debió precisar el sentido de la frase entrecomillada en B), que equivale a decir que ξ es un ruido blanco estándar. Probó, entre otras, las siguientes afirmaciones:

i) Si $x(0)$ es independiente del proceso $\{u(t), t \geq 0\}$, la

fórmula (3) da la solución de (2), y

ii) Si, además, $x(0) \sim N(m_0, \sigma^2)$, el proceso estocástico resultante $\{x(t), t \geq 0\}$ también es gaussiano, con media y varianza dadas por

$$m_x(t) := e^{-\lambda t} m_0, \text{Var}(x(t)) := \frac{\sigma^2}{2\lambda} (1 - e^{-2\lambda t})$$

Vemos que, si se toma en cuenta la variabilidad de la cantidad alimentada de reactivo A al reactor, no se puede asegurar que se alcance el régimen transitorio cuando $\lambda > 0$, tal y como se afirmó en la sección anterior. Sin embargo, si se llega a un estado estacionario estocástico, a saber la distribución normal con media cero y varianza $\sigma^2/2\lambda$. Así pues, este modelo predice que, en promedio, se mantendrá el estado estacionario deseado, pero que habrá fluctuaciones en torno a éste (véase la Fig. 1.1).

A su vez, el trabajo de Doob antes citado se basa en el de Wiener [Paley-Wiener, 1934], donde se definen las integrales de la forma

$$\int_a^b f(t) \xi(t) dt, \quad (4a)$$

donde ξ es un ruido blanco estándar y f es una función continuamente diferenciable; dichas integrales se llaman de Wiener. Desde el punto de vista de este trabajo, las propiedades más interesantes de esta integral (4a) son las siguientes:

$$\int_a^b f(t) \xi(t) dt \text{ es una variable aleatoria gaussiana, con}$$
$$E \int_a^b f(t) \xi(t) dt = 0, \quad E \left[\int_a^b f(t) \xi(t) dt \right]^2 = \int_a^b f(t)^2 dt. \quad (4b)$$

En [Hernández, 1989] hemos dado una presentación elemental de la integral de Wiener, dentro del marco de la teoría de las distribuciones de Schwartz. Se refiere a los lectores interesados a dicho trabajo, para la justificación de lo anterior.

Por otro lado, puede definirse el concepto de ruido blanco estándar vectorial, $\xi(t) := (\xi_1(t), \dots, \xi_m(t))$, donde $\xi_j(t)$ es un ruido blanco gaussiano estándar escalar ($j = 1, \dots, m$), cada uno de ellos independiente de los demás. Si $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{n \times m}$ es continuamente diferenciable, la integral vectorial (4a) se define de manera natural. Sigue cumpliéndose (4b), ahora en la forma

$$E \int_a^b f(t) \xi(t) dt = 0, \quad E \left(\int_a^b f(t) \xi(t) dt \right) \left(\int_a^b f(t) \xi(t) dt \right)^T = \int_a^b f(t) f(t)^T dt.$$

Armados de estos conceptos, podemos reconsiderar la ecuación diferencial (1.5), antes de desprestigiar los términos de orden superior para así linealizar (3). Una manera de tomarlos en cuenta de manera aproximada es substituirlos por un término de ruido, digamos un término de la forma $\sigma \xi(t)$, con $\sigma \in \mathbb{R}^{n \times m}$. Suponer que el ruido es blanco tiene la ventaja de que permite aplicarle al modelo resultante

$$\dot{u} = Au + \sigma \xi(t) \quad (5)$$

el aparato matemático de la integral de Wiener. Si el ruido no es blanco pero sí es gaussiano, puede obtenerse a partir de ruido blanco como solución de una ecuación diferencial estocástica del tipo (5), por lo que no se pierde generalidad al suponer que ξ en (5) es ruido blanco estándar.

La solución de (5) correspondiente a la condición inicial u_0 , que suponemos es independiente del futuro del ruido, está dada por

$$u(t) = e^{tA} u_0 + \int_0^t e^{(t-s)A} \sigma \xi(s) ds. \quad (6a)$$

De cuanto sabemos de la integral de Wiener, es claro que el proceso estocástico $\{u(t), t \geq 0\}$ es gaussiano, con media $m(t)$ y matriz de covarianza $K(t)$, donde

$$m(t) := e^{tA} E u_0, \quad K(t) := \int_0^t e^{(t-s)A} \sigma \sigma^T e^{(t-s)A^T} ds. \quad (6b)$$

Por diferenciación directa, vemos que m y K satisfacen las ecuaciones diferenciales $\dot{m} = Am$ y

$$\dot{K} = AK + KA^T + \sigma \sigma^T, \quad (7a)$$

respectivamente. Esta última ecuación se llama la ecuación diferencial de Liapunoff en la literatura de control automático [Brockett,1970], donde surge naturalmente al investigar la estabilidad de sistemas lineales.

De lo que ya sabemos, la media $m(t)$ efectivamente tiende a cero cuando $t \rightarrow \infty$, siempre que todos los valores propios de A tengan parte real negativa. Por el contrario, no sucede lo mismo con la matriz de covarianza. Bajo la misma hipótesis [Brockett,op.cit.] $K(t) \rightarrow \bar{K}$, esta última una matriz constante que satisface la ecuación matricial

$$A\bar{K} + \bar{K}A^T + \sigma\sigma^T = 0, \quad (7b)$$

conocida como ecuación algebraica de Liapunoff. Por substitución directa [Brockett,op.cit.] se verifica que

$$\bar{K} = \int_0^{\infty} e^{SA} \sigma \sigma^T e^{SA^T} ds$$

Un resultado clásico de la teoría de sistemas lineales [Brockett,op.cit.] afirma que si el par (A,σ) es controlable, entonces $\bar{K} > 0$ si y sólo si A es estable. Así pues, en el caso controlable y estable la matriz de covarianza del error será positiva definida, y el error podrá tomar cualquier valor.

Resumiendo: si los valores propios de A tienen todos parte real negativa, el error se amortigua en promedio con el paso del tiempo, pero se tienen fluctuaciones gaussianas de las variables de proceso en torno al valor estacionario deseado, tal y como indica la Fig. 1.1. Si, además, el par (A,σ) es controlable, entonces dichas fluctuaciones tienen covarianza positiva, por lo que pueden tomar cualquier valor.

3. El ruido en los sistemas no lineales

En general, la ecuación (2.1)

$$\dot{x} = -\frac{1}{T}x - \psi(x) + \sigma\xi(t), \quad (1)$$

donde ξ es el ruido blanco estándar, es no lineal, y como tal debería tratarse. Claramente esta ecuación diferencial es

equivalente a la ecuación integral

$$\underline{x(t)} = x(0) + \int_0^t \left(-\frac{1}{\tau} x(s) - \psi(x(s)) \right) ds + \sigma W(t), \quad (2)$$

donde

$$W(t) := \int_0^t \xi(s) ds \quad (3)$$

es una integral de Wiener. Dada $x(0)$ independiente del futuro del ruido, se puede obtener una aproximación al proceso estocástico $\{x(t), t \geq 0\}$ mediante un esquema de aproximaciones sucesivas basado en la representación integral (2), tal y como se hace en el caso de ecuaciones diferenciales ordinarias. Basta para ello poder muestrear eficientemente el proceso estocástico $\{W(t), t \geq 0\}$.

Por otro lado, es muy fácil obtener modelos estocásticos no lineales en el estudio de los reactores químicos, con no linealidades más severas que la de (1). Para dar un ejemplo, regresemos al modelo original (1.9) y supongamos ahora que es el flujo a la salida del reactor el que varía, digamos según

$$q(t) = \bar{q} \left(1 + b\xi(t) \right),$$

donde $b > 0$ es un factor de escala y $\{\xi(t), t \geq 0\}$ es un ruido blanco estándar. El mismo procedimiento que llevó a (2.1) conduce ahora al nuevo modelo estocástico no lineal

$$\dot{x} = -x/\bar{\tau} - \psi(x) + \sigma(x)\xi(t), \quad (4a)$$

donde ahora

$$\bar{\tau} := \frac{V}{\bar{q}}, \quad \sigma(x) := \frac{b}{\bar{\tau}} \left(\bar{C}_A + x \right). \quad (4b)$$

Nótese que también el término de ruido en la ecuación (4a) es no lineal, pues su amplitud depende del valor de la solución.

Los modelos estocásticos (1) y (4) son caso particular del modelo general

$$\dot{x} = b(x) + \sigma(x)\xi(t), \quad (5)$$

que por desgracia ya no puede tratarse con la integral de Wiener únicamente. En efecto, si queremos expresarlo en su versión integral análoga a (2) se llega formalmente a

$$x(t) = x(0) + \int_0^t b(x(s)) ds + \int_0^t \sigma(x(s)) \xi(s) ds,$$

donde figuran una integral ordinaria y una integral estocástica. Sin embargo, es claro que esta segunda no es una integral de Wiener, pues en ella figura un integrando también estocástico, mientras que el integrando en (2.4a) es determinístico. Así pues, aún para expresar un modelo no lineal se requiere extender el concepto de integral estocástica.

Una tal extensión fue propuesta por K. Ito a fines de la década de los 40's, y se basa en el proceso estocástico $\{W(t), t \geq 0\}$ definido en (3), en lugar de basarse en el ruido blanco. En el cálculo resultante, la ecuación diferencial estocástica (5) se escribe en la forma

$$dx = b(x)dt + \sigma(x)dW \quad (6a)$$

y su versión integral en la forma

$$x(t) = x(0) + \int_0^t b(x(s)) ds + \int_0^t \sigma(x(s)) dW(s). \quad (6b)$$

La notación está inspirada en (3), pues de ahí se desprende que " $dW = \xi(t)dt$ ". La integral estocástica que figura en (6b) se llama una *integral de Ito*, objeto matemático perfectamente definido. Véase [Schuss, 1980].

De la misma definición (3) resulta que

$$i) W(0) = 0,$$

y de las propiedades (2.4b) de la integral de Wiener es claro que, para cualquier elección de $t \geq 0, h > 0$

$$ii) W(t+h) - W(t) \text{ es gaussiano, con media } 0 \text{ y varianza } h.$$

A su vez, la propiedad B) del ruido blanco estándar, a saber

B) Su autocorrelación $C(\tau)$ "presenta un pico muy pronunciado

en $\tau=0$ "

significa que los valores de $\xi(t_1)$ y $\xi(t_2)$ son independientes cuando $t_1 \neq t_2$. Por lo tanto, es de esperarse que las integrales

$$\int_a^b \xi(t) dt \text{ e } \int_c^d \xi(t) dt$$

sean variables aleatorias independientes si los intervalos $[a,b]$ y $[c,d]$ son ajenos. De aquí resulta la propiedad de *independencia de los incrementos* del proceso $\{W(t), t \geq 0\}$, a saber

iii) Para cualquier elección de $n \geq 1$, $0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_n < \infty$, las variables aleatorias $W(t_1)$, $W(t_2) - W(t_1), \dots, W(t_n) - W(t_{n-1})$ son independientes.

De hecho, las propiedades i), ii) y iii), que aquí se dieron como consecuencia de las propiedades de la integral de Wiener, en realidad fueron consideradas por el mismo N. Wiener años antes de definir dicha integral. En efecto, en [Wiener, 1923] se construyó rigurosamente un espacio probabilístico (Ω, \mathcal{A}, P) y una familia de variables aleatorias $\{W(t), t \geq 0\}$ definidas sobre dicho espacio que satisfacen las propiedades i), ii), iii). Dicho proceso estocástico se conoce por ello como *proceso de Wiener*. A su vez, su construcción se basó en los estudios de A. Einstein sobre el movimiento browniano (véase [Einstein, 1905]), a los que el modelo de Wiener proporciona una base matemática sólida. Entre las propiedades fundamentales del proceso de Wiener figura la siguiente:

Con probabilidad 1, las trayectorias $t \mapsto W(t)$ son funciones continuas en todo punto, pero no diferenciables en ningún punto de su dominio.

Así pues, en el modelo de Einstein-Wiener para el movimiento browniano, la partícula browniana tiene trayectorias continuas pero no tiene velocidad. Los estudios de [Uhlenbeck-Ornstein, 1930] fueron encaminados precisamente a dar un modelo *dinámico* para este fenómeno, en el que la partícula browniana tuviera no sólo

posición sino también velocidad: esta última satisface la ecuación de Langevin (2.2a) y la trayectoria se obtiene por integración. Véase [Nelson,1967].

En el caso lineal la controlabilidad de (2.5) respecto al ruido ξ juega un papel sumamente importante: hace que la estabilidad de A sea equivalente a que la distribución de equilibrio tenga covarianza positiva. En el caso no lineal, la solución de (5) ciertamente no es gaussiana, pero la condición anterior sigue teniendo sentido: equivale a que el ruido llene todo el espacio. Para ello, la controlabilidad del sistema no lineal (5) sigue jugando un papel esencial. El estudio de estas cuestiones es un tema actual de investigación en sistemas estocásticos.

No intentaremos dar aquí una presentación siquiera somera de la teoría de las ecuaciones diferenciales estocásticas (6); en su lugar referimos a los lectores interesados a [Schuss,1980], donde encontrarán mucha información al respecto, con referencia también a los aspectos aplicativos. Si mencionaremos que, en la práctica, los modelos (6) pueden manejarse mediante técnicas numéricas muy parecidas a las que se utilizan para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias, adecuadamente modificadas para tomar en cuenta las diferencias que presenta el cálculo estocástico asociado a la integral de Ito respecto al cálculo diferencial e integral ordinario. Véanse al respecto los artículos de revisión [Pardoux-Talay,1985], [Kloeden-Platen,1989].

4. El origen del ruido en los modelos de proceso

Si se toman en consideración todos los componentes de un proceso químico, con el enorme número de variables de proceso involucradas, resulta un sistema complejo de gran escala en el sentido moderno del término [Siljak,1978]. El modelo matemático resultante será un sistema con un gran número de ecuaciones diferenciales ordinarias y/o parciales, y se debe simplificar mediante alguno de los métodos disponibles en la literatura, pues de lo contrario no se puede utilizar; véanse p.ej. [Aris,1980], [Côme,1979], [Hernández,1987b], [Siljak,op.cit.], [Wei-Kuo,1969].

Una estrategia de simplificación que se sigue a menudo pide partir el vector de estados de (1.3) en dos partes: un componente rápido y uno lento, este segundo de dimensión mucho menor que el primero. La simplificación se da porque se desprecia la dinámica de la parte rápida, reduciendo así la dimensión del problema. Veamos lo anterior aplicado a un ejemplo, que por simplicidad supondremos es un sistema lineal de ecuaciones diferenciales ordinarias en \mathbb{R}^N , a saber

$$\dot{z} = Qz. \quad (1)$$

Por cierto que en la práctica cada tasa de variación dependerá sólo de algunas (más bien pocas) de las N componentes del vector de estado, por lo que la matriz Q será rala. En general, en lugar de (1) se tendrá un sistema no lineal de ecuaciones diferenciales en \mathbb{R}^N , como (1.3), y entonces el jacobiano $f'(x)$ será una matriz rala.

Reescribamos el vector $z \in \mathbb{R}^N$ como (y, η) , con $y \in \mathbb{R}^n$, donde $n < N$ y supongamos que el vector η contiene las variables catalogadas como rápidas. Mediante un cambio de escala temporal adecuado en las variables rápidas, el sistema (1) se puede reescribir bajo la forma

$$\dot{y} = N_{11}y + N_{12}\eta \quad (2a)$$

$$\varepsilon \dot{\eta} = N_{21}y + N_{22}\eta \quad (2b)$$

donde $\varepsilon > 0$ es un parámetro "pequeño". Pudiera ser que se necesitara más de un cambio de escala temporal, pues no todas las variables rápidas tienen por qué estar igualmente aceleradas; ello se reflejaría en la introducción de más de un parámetro pequeño y no alteraría substancialmente lo que sigue. Por ello supondremos válida la estructura (2). Supongamos además que N_{22} es no singular.

Dicho lo anterior, podemos simplificar el sistema (1) haciendo la consideración de que las variables rápidas siguen a las lentas (estas últimas son "el paso que controla"). Dicho en otras palabras, tomaremos $\varepsilon = 0$ en (2b), por lo que la relación algebraica

$$\eta = -N_{22}^{-1}N_{21}y$$

da la dinámica de las variables rápidas. Basta substituir en (2b) para obtener la dinámica simplificada

$$\dot{y} = \left(N_{11} - N_{12}N_{22}^{-1}N_{21} \right) y. \quad (3)$$

Todo el tratamiento anterior es determinístico, y es típico de una gran variedad de simplificaciones que se introducen al modelar sistemas complejos. Una alternativa, que también se usa cuando el número de componentes rápidas es excesivamente alto, pide simplemente substituir el término $N_{12}\eta$ por un término de ruido, digamos $\sigma\xi$, como se hizo más de una vez en la sección 2. De esta manera se obtiene el sistema reducido

$$\dot{y} = N_{11}y + \sigma\xi(t), \quad (4)$$

del tipo de (2.5).

Tanto (3) como (4) son versiones simplificadas (recuérdese que $n < N$) de (1), obtenidas al despreocuparse de la dinámica de las componentes rápidas del vector de estado. Llegar al primero supone realizar el esfuerzo computacional necesario para efectuar las operaciones matriciales indicadas en (3); esto es factible si $N-n$ no es demasiado grande y conviene para ello que las matrices involucradas sean ralas. Si $N-n$ es demasiado grande, lograr la reducción supone el precio de introducir un término aleatorio a cambio de no realizar un esfuerzo computacional demasiado oneroso.

Por ejemplo, en Física Estadística [Uhlenbeck-Ornstein, 1930] se introduce la ecuación de Langevin

$$m\dot{v} = -\beta v - \phi'(x) + \sigma\xi(t) \quad (5)$$

para la velocidad de una partícula browniana de masa m que se difunde en un fluido, bajo la acción de un potencial externo ϕ . Se justifica esta ecuación mediante consideraciones del siguiente tipo:

"El medio ejerce dos tipos de acciones sobre la partícula:

a) una fuerza viscosa que tiende a oponerse al movimiento, representada por el término $-\beta v$ en (5), y

b) una fuerza fluctuante, resultado del gran número de choques con la partícula que tienen las moléculas que la rodean; esta fuerza queda representada mediante el término de ruido $\sigma \xi(t)$.

Tomando en cuenta la fuerza externa $-\phi'(x)$, la ecuación (5) resulta de aplicar la Segunda Ley de Newton".

Es claro que podría escribirse el enorme sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que representa el movimiento de las partículas del medio (digamos que son moléculas de agua) junto con la browniana, suponiendo un cierto potencial de interacción. Dado que las moléculas de agua (el baño térmico) son mucho más ligeras, su dinámica sería mucho más rápida que la de la partícula browniana. La ecuación (5) resultaría entonces de substituir la fuerza fluctuante de b) por el término de ruido. Esta es una explicación cualitativa de dicha construcción, y hay una voluminosa literatura encaminada a volverla cuantitativa; véanse [Ford et al, 1965], [Picci, 1986, 1988], por ejemplo.

Claramente, análogas consideraciones se aplican a la justificación de modelos con ruido para procesos químicos, como los dados en las dos secciones precedentes. Por ejemplo, podría pensarse en

a) escribir el enorme número de ecuaciones diferenciales que gobiernan la evolución temporal de todas las variables de un proceso,

b) aislar de ahí un pequeño número de variables cuya dinámica controle la del proceso total (las variables lentas), y

c) substituir el efecto que tienen las variables rápidas sobre ellas mediante términos de ruido adecuadamente elegidos.

Entendido este proceso, se estaría en condiciones de

construir modelos matemáticos simplificados para los procesos químicos. Actualmente se hace lo anterior en forma cualitativa, pero falta la preocupación de verificar la validez de tal simplificación como sí se hace en la Física.

Bibliografía

Aris, R. "Hierarchies of models in reactive systems" en Stewart, W.E., W.H. Ray & C.C. Conley, eds. *Dynamics and modelling of reacting systems*, pp.1-35. Academic Press, New York, 1980.

Bellman, R., *Stability theory of differential equations*, Dover Publications Inc., New York, 1953.

Brockett, R.W., *Finite dimensional linear systems*, John Wiley & Sons, New York, 1970.

Côme, G.M., "Singular perturbation theory in chemical kinetics", en Hemker, P.W. & J.J.H. Miller, eds., *Numerical analysis of singular perturbation problems*, Academic Press, New York, 1979.

Doob, J.L., "The brownian movement and stochastic equations", *Ann. Math.* 43 (1942), 351-369. Reimpreso en [Wax, 1954].

Einstein, A., *Ann. Phys.* 17 (1905), 549, reimpreso en R. Fürth (ed.) *Investigations on the theory of the brownian movement*, Dover Publications, Inc., New York, 1956.

Ford, G.W., M. Kac & P. Mazur, "Statistical Mechanics of assemblies of coupled oscillators", *J. Math. Phys.* 6 (1965), 504-515.

Hernández, D.B. "El ruido: su caracterización, eliminación y síntesis", p. 21 et seq. de J.A. de la Peña, C. Prieto, G. Valencia y L. Verde (eds.), Programa del XIX Congreso de la Sociedad Matemática Mexicana (Guadalajara, 1986). *Aportaciones Matemáticas, Serie Comunicaciones*, Núm. 4, Soc. Mat. Mex., 1987.

_____, "Model structure simplification", pp. 3079-3082 de M.G. Singh (ed.) *Systems and Control Encyclopedia: Theory, technology, Applications*. Pergamon Press, Oxford, 1987

_____, "De los racionales al ruido blanco", Programa del XXI Congreso de la Sociedad Matemática Mexicana (Hermosillo, 1988). *Aportaciones Matemáticas, Serie Comunicaciones*, Soc. Mat. Mex. 1989 (en prensa).

Kloeden, P.E & E. Platen, "A survey of numerical methods for stochastic differential equations", Rep. Nr. 204, Institut für Dynamische Systeme, Universität Bremen, 1989 (por aparecer en la revista *Stochastic Hydrology and Hydraulics*).

Kramers, H. & K.R. Westerterp, *Elements of chemical reactor design and operation*, Chapman & Hall, Ltd. London, 1963.

Nelson, E., *Dynamical theories of brownian motion*, Princeton University Press, Princeton NJ, 1967.

Paley, R.E.A.C. & N. Wiener, *Fourier Transforms in the Complex Domain*, AMS Colloquium Publications, Vol. XIX, 1934.

Pardoux, E. & D. Talay, "Discretization and simulation of stochastic differential equations", *Acta Applicandae Mathematicae*, 3 (1985), 23-47.

Picci, G. "Application of stochastic realization theory to a fundamental problem of statistical physics", pp. 211-258 de Byrnes, C.I. & A. Lindquist, eds., *Modelling, identification and robust control*, North Holland, Amsterdam, 1986.

_____, "Stochastic aggregation", pp. 493-501 de Byrnes, C.I., C.F. Martin & R.E. Saeks, *Linear circuits, systems and signal processing: theory and application*, North Holland, Amsterdam, 1988.

Siljak, D.D., *Large scale dynamical systems: stability and*

structure, North Holland, Amsterdam, 1978.

Schuss, Z., *Theory and applications of stochastic differential equations*, John Wiley & Sons, New York, 1980..

Uhlenbeck, G.E. & L.S. Ornstein, "On the theory of the brownian motion", *Phys. Rev.* 36 (1930), 823-841. Reimpreso en [Wax, 1954].

Wax, N.(ed.), *Selected papers on noise and stochastic processes*, Dover Publications, Inc., New York, 1954.

Wei, J. & J.C.W. Kuo, "A lumping analysis in monomolecular reaction systems", *Ind. Eng. Chem. Fundamentals* 8 (1969), 114-123, 124-133.

Wiener, N., "Differential space", *J. Math. Phys.* 2 (1923), 131-174.