

Gemelos digitales en la industria de procesos

Cesar de Prada^{a,b,*}, Santos Galán-Casado^c, Jose L. Pitarch^d, Daniel Sarabia^{e,b}, Anibal Galán^{a,b}, Gloria Gutiérrez^{a,b}

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

^b Instituto de Procesos Sostenibles (IPS), Universidad de Valladolid, C/Real de Burgos, s/n, 47011 Valladolid, España.

^c Departamento de Ingeniería Química Industrial y del Medio Ambiente, ETSII, Universidad Politécnica de Madrid (UPM), 28006 Madrid, España.

^d Instituto Universitario de Automática e Informática Industrial (ai2), Universitat Politècnica de Valencia, Camino de Vera, s/n, 46022 Valencia, España.

^e Departamento de Ingeniería Electromecánica, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Burgos, Avda. Cantabria, s/n, 09006, Burgos, España.

To cite this article: de Prada, C., Galán-Casado, S., Pitarch, J.L., Sarabia, D., Galán, A., Gutiérrez G. 2022. Digital Twins in the Process Industry. Revista Iberoamericana de Automática e Informática Industrial 19, 285-296. <https://doi.org/10.4995/riai.2022.16901>

Resumen

Los gemelos digitales son plantas virtuales dotadas de una arquitectura y funcionalidades que les convierten en herramientas útiles para mejorar muchos aspectos de la operación de los procesos, desde el control a la optimización de los mismos. No obstante, para ser usados en tiempo real como herramientas eficaces de toma de decisiones, hay varios problemas abiertos que requieren investigación adicional, entre ellos los relativos a la actualización de los modelos en tiempo real y a la consideración explícita de las incertidumbres presentes en los modelos y los procesos. Este artículo discute su arquitectura y papel en el contexto de Industria 4.0, y recoge y analiza una experiencia concreta referida a la red de hidrogeno de una refinería de petróleo que ilustra las posibilidades de utilización industrial de los gemelos digitales, así como los problemas abiertos que presenta su implantación en la industria de procesos.

Palabras clave: Modelado y toma decisiones en sistemas complejos, Simulación, Control y optimización en tiempo real, Estimación de estados y parámetros, Seguimiento y evaluación del funcionamiento, Soporte al operador humano.

Digital twins for process industry

Abstract

Digital Twins are virtual plants with an architecture and functionalities that make them actual useful tools for improving many aspects related to process operation, from its control to optimization. Nevertheless, there are several open problems that demand additional research before Digital Twins can be used in real-time as useful tools in decision making. Among them we can cite those related to model updating in real-time and the explicit consideration of uncertainty in models and processes. This paper discusses its architecture and role in the context of Industry 4.0 and, at the same time, analyzes one case study referred to the hydrogen network of an oil refinery that illustrates the possibilities of industrial use of digital twins, as well as the open problems associated to its implementation in the process industry.

Keywords: Modelling and decision making in complex systems, Simulation, Real time optimization and control, Parameter and state estimation, Monitoring and performance assessment, Human operator support.

1. Introducción

La idea del *Digital Twin* (gemelo digital, o planta virtual) no es nueva y el núcleo de la misma, construido en torno a las ideas de modelado y simulación de un proceso determinado, tiene largo recorrido. De hecho, aunque la primera definición formal del término apareció en 2010 en la NASA (Shafto,

2010; Grieves, 2019), se puede considerar que su primer uso sería el conjunto de simuladores empleados en la misión Apollo 13 en 1970. Durante todo este tiempo, en distintos campos, se han desarrollado modelos y simulaciones de sistemas muy diversos para usarlos en un amplio rango de aplicaciones tales como diseño, control, detección de fallos, entrenamiento de personal, etc. No obstante, su uso en línea estaba limitado por las dificultades técnicas para recoger información diversa y

*Autor para correspondencia: prada@autom.uva.es

procesarla adecuadamente. Sin embargo, dentro del marco de la digitalización que está implantándose en muy distintos ámbitos, y en particular al uso en sistemas de producción en Industria 4.0, el concepto de *Digital Twin* (DT) amplía considerablemente su alcance más allá de la simulación de un proceso y presenta elementos nuevos que vale la pena mencionar.

La primera y principal característica es que el núcleo de un DT es, efectivamente, una representación virtual de la realidad, en forma de modelo, pero estructurada para la ayuda a la toma de decisiones en tiempo real relacionadas con el funcionamiento del sistema considerado. Precisamente, la actualización y el uso para la toma de decisiones en línea, distingue a un DT de una simulación convencional. Ello implica que deben relacionarse aspectos diversos, de modo que la representación virtual debe tener un alcance más amplio que abarque no solo modelos de procesos o equipos físicos, sino también a otros elementos necesarios relacionados, como pueden ser cadenas de suministro, personal, materiales, costes, etc. y, en general, datos de proceso, procedimientos para convertir datos en información, y herramientas para explotar dicha información y los modelos. Por tanto, el DT debe incorporar los elementos necesarios de captura de datos, gestión de información y herramientas de actualización de modelos en tiempo real para que el DT refleje de forma fidedigna el estado y dinámica del sistema considerado.

Los DT se aplican hoy día en una amplia variedad de campos, como pueden ser el urbanismo, la construcción naval, la gestión de aerogeneradores, etc., lo que implica que sus características sean también muy diversas. De hecho, podemos hablar de una gradación de funcionalidades y arquitecturas respecto a los distintos productos que están apareciendo en el mercado (KBC, 2021; Boss *et al.*, 2020; Bröcker *et al.*, 2021). Cada empresa está orientando sus desarrollos en gemelos digitales hacia las tecnologías y aspectos de los mismos en las que son expertos. Por ejemplo, Microsoft con Azure Digital Twin proporciona soporte en la nube para la recopilación de datos (mediante IoT, i.e. internet de las cosas) con los que construir aplicaciones para su visualización y análisis (Microsoft Corporation, 2020). Yokogawa plantea soluciones en torno a arquitecturas que integran sistemas de control y de información de planta (Yokogawa, 2022). AVEVA se centra en la simulación (Aveva, 2020). Siemens une la experiencia de varias de sus empresas (Bentley en CAD de plantas para ofrecer acceso a un repositorio de la misma, incluso con realidad virtual, y PSE/gPROMs a la simulación de procesos), así como la suya propia en control de procesos (Oh *et al.*, 2021; Pfeiffer *et al.*, 2019). No obstante, en todos los casos estamos hablando de productos ya existentes combinados en aplicaciones propietarias, difícilmente intercambiables o combinables. Es dudoso que la mera yuxtaposición de elementos preexistentes sea el germen del gemelo digital del futuro.

Por ello, restringiéndonos al campo industrial y, en particular, a la industria de procesos para poder dar más unidad y precisión al contenido de este artículo, vale la pena tratar de definir lo que entendemos puede ser un DT en el marco de Industria 4.0. En este sentido, una primera caracterización de un DT debería tener en consideración los siguientes elementos:

- Debe incluir distintos aspectos de la realidad, lo que implica que debe poder incorporar distintos tipos de representaciones, o modelos de la misma.

- Los modelos y la información deben estar actualizados, para poder responder a consultas o decisiones en tiempo real.
- Debe estar dotado de un conjunto de herramientas y procedimientos de cálculo que usen conjuntamente modelos e información disponible para proporcionar ayuda en la toma de decisiones.
- Debe poder gestionar, interrelacionar e integrar todos esos modelos, herramientas e información cuando sea necesario y presentar los resultados adecuadamente.

Esto lleva a concebir un DT, más que como un entorno de simulación, como una arquitectura que integra diversos módulos “enchufables”. En particular, una base de datos alimentada en tiempo real desde el proceso que proporcione información actualizada y coherente, un conjunto de modelos en un entorno de simulación capaces de “hablarse” entre sí mediante alguna capa de comunicaciones, y un conjunto de herramientas para tareas tales como de análisis de datos, estimación de variables y reconciliación de datos, cálculo de predicciones, cálculo de KPIs, optimización, visualización, etc.

En este artículo se expone en primer lugar esta visión de lo que un gemelo digital debería ser en el ámbito de la industria de procesos, haciendo una propuesta de estructura y funcionalidades, al tiempo que se señalan también los retos que el desarrollo e implantación de un DT puede presentar y las oportunidades de investigación que se abren. Estas reflexiones se acompañan de un caso de estudio industrial en el que los autores han tratado con la problemática existente: una red de hidrógeno en una refinería de petróleo.

2. Arquitectura

La Figura 1 trata de sintetizar gráficamente lo expuesto anteriormente, recogiendo los elementos fundamentales de un DT. En primer lugar, un conjunto de modelos como núcleo fundamental. Pero éstos deben de venir acompañados de métodos y herramientas de ajuste de parámetros, validación, identificación, etc., para su actualización en tiempo real. Todo ello constituye el bloque superior izquierda de la figura.



Figura 1: Esquema de los elementos principales de un DT.

El segundo bloque lo forman los sistemas de toma de datos y mantenimiento de la información, apoyados en bases de datos en tiempo real, que son imprescindibles para la actualización de modelos y la toma de decisiones. Las herramientas para esta toma de decisiones forman el tercer bloque, típicamente basadas en optimización y simulación. Finalmente, la interacción con los usuarios representa el último bloque del conjunto, y en los sistemas industriales cobra cada vez más relevancia.

La forma en la que estos elementos interaccionan podría resumirse en la Figura 2. La digitalización del proceso o sistema considerado permite obtener datos y enviarlos a una base de datos a medida que éstos se generan. Esta base de datos debe

recoger no sólo históricos del proceso, laboratorio, etc., sino también los elementos necesarios para tomar decisiones o simular comportamientos dinámicos en diversas circunstancias y con variedad de objetivos. Para ello se necesitan incorporar datos tales como características físicas, propiedades químicas, termodinámicas, precios y, en general, los que sean relevantes para los objetivos del DT.

La base de datos actúa tanto como servidor de información al resto de módulos como receptora de las consultas que los usuarios puedan hacer al DT. La información almacenada en el DT debe poder servir para actualizar sus modelos y ser usada por las herramientas que implementan funcionalidades del DT. Por su parte, dichas herramientas requerirán también de los modelos adecuados para responder a las consultas que puedan efectuarse. Estas operaciones implican la gestión y coordinación temporal y funcional de un conjunto de aplicaciones y elementos, que es la tarea central del DT. Los resultados de su utilización, además de almacenarse en la base de datos, se ponen a disposición de los usuarios y/o se aplican en el proceso.

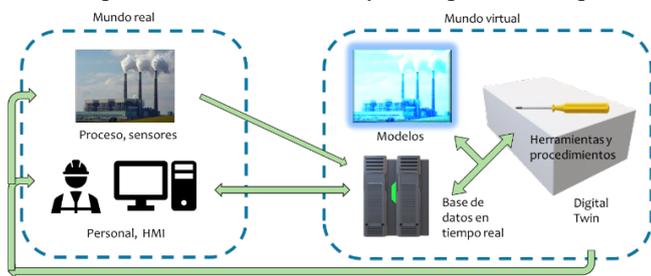


Figura 2: Interacción entre el mundo físico y componentes de un DT en el mundo virtual.

Como tal, el DT puede considerarse un repositorio de información actualizada y elaborada (datos y modelos) de referencia en la empresa, para su explotación dando respuesta a preguntas complejas del tipo ¿Qué pasa si...? ¿Qué se necesita para...? Así como recomendaciones sobre la mejor manera de hacer una operación.

Cuando el DT se concibe desde la fase de diseño de una nueva planta, su desarrollo avanza en paralelo al de ésta, constituyendo los modelos y documentación de ingeniería la base del DT. De esta forma se reduce su coste y se integra de forma natural en todo el ciclo de vida del proceso. Crear un DT para una planta no existente (caso al que no orientamos el presente artículo) es obviamente oneroso y complejo, debiendo ajustarse su alcance y estructura.

La funcionalidad y ventajas que proporciona un DT bien estructurado podrían resumirse en:

- Mejora el conocimiento de cómo funcionan los procesos, la sensibilidad respecto a parámetros y la interdependencia de sus componentes.
- Permite observar y supervisar los recursos que se utilizan o las secuencias de actividades involucradas en la operación.
- Permite experimentar con bajo coste y riesgo distintas alternativas bajo distintos escenarios, también en tiempo real.
- Permite analizar situaciones pasadas para identificar el origen de problemas o estudiar degradaciones de equipos para mejorar los programas de mantenimiento.
- Facilita estudiar la mejor forma de operar o planificar la operación de un proceso usando herramientas de optimización.

- Puede usarse para entrenar personal durante todo el ciclo de vida de la planta.

Muchas de éstas son comunes a la simulación, pero mejoradas por la integración con otras herramientas y, en particular, por el aspecto de operación en tiempo real.

De hecho, los entornos de visualización/virtualización han experimentado mejoras considerables. Los avances tecnológicos en términos de Inteligencia Artificial y Realidad Virtual permiten desarrollar entornos de visualización más eficientes para la supervisión y gestión de la información en tiempo real, recibida en forma de datos o generada por el DT. Herramientas como los modernos paneles (*dashboards* en terminología inglesa) posibilitan recopilar datos desde distintas fuentes, agregarlos y mostrarlos simultáneamente, presentándolos de manera que lo importante destaque a primera vista, haciéndolos más accesibles y fáciles de interpretar. Por otra parte, la aplicación de realidad virtual y aumentada en el ámbito de DT, ofrece la posibilidad de crear un ambiente inmersivo para formación, entrenamiento, reparación de averías, etc., al poder superponer información elaborada a la representación virtual de la planta (Fracaro *et al.* 2022).

Comentaremos a continuación los componentes principales de un DT, dedicando especial atención a modelos y herramientas en el contexto de la industria de procesos. En este ámbito, el grado de digitalización y automatización de la producción por regla general es muy alto, disponiéndose de salas de control con sistemas de control distribuido (DCS) y de bases de datos en tiempo real (por ejemplo, PI de OSIsoft). Por otra parte, la proliferación de dispositivos IoT facilita cada vez más la recogida de datos, por lo que no parece probable que este aspecto sea el mayor obstáculo a la hora de implementar los futuros DTs.

3. Modelos

Los modelos que dan funcionalidad al Digital Twin pueden ser de diversos tipos y complejidades, existiendo posiblemente una jerarquía de los mismos. Atendiendo a su carácter, hay, al menos, tres tipos de información y modelos que suelen estar presentes: Modelos estructurales, modelos de eventos del funcionamiento de la planta considerada y modelos dinámicos de los procesos.

3.1 Modelos descriptivos de la estructura

Este tipo de modelos e información describen los componentes y estructura física del sistema, lo cual puede incluir:

- Planos de ubicación de instalaciones.
- Diagramas P&ID (Piping and Instrumentation Diagram) para describir los equipos y la configuración del proceso y su instrumentación.
- Isométricas con indicaciones de las tuberías, diámetros, cotas, etc.
- Unifilares, con indicaciones de los equipos y conexionado eléctrico.
- Modelos 3D con la situación de todos los componentes, racks de cables o tuberías, etc., en tres dimensiones.

Ejemplos de los cuales pueden verse en la Figura 3. Estos modelos pueden ser estáticos, en cuyo caso la explotación de la información asociada está bastante limitada a un uso visual.

No obstante, una adecuada digitalización de los mismos incrementa de forma exponencial las posibilidades de integración y explotación de esta información por otros elementos o herramientas del DT. Dicha digitalización implica proporcionar atributos que permitan consultas como determinar “el elemento de medida de temperatura conectado al equipo X” o “la bomba impulsora del caudal de la tubería Z”, y asociándoles propiedades, tamaños, etc. desde un software, al estilo de la interfaz inteligente del sistema experto G2.

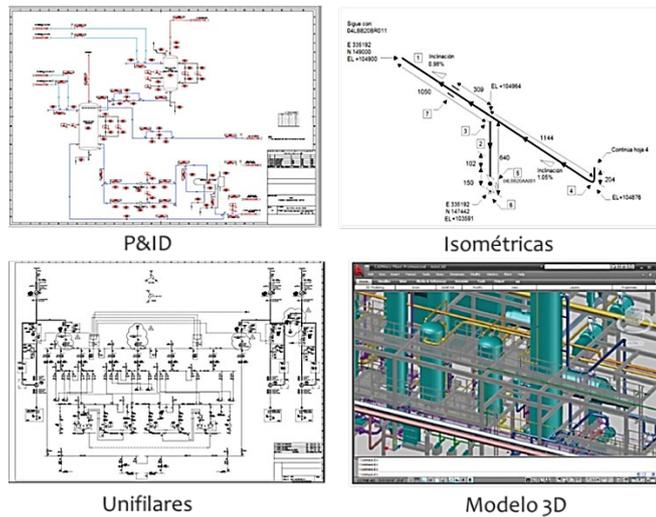


Figura 3: Distintas representaciones de modelos descriptivos de la estructura de un proceso industrial.

3.2 Modelos de eventos

Las representaciones relativas a cuándo funcionan e interactúan los distintos equipos en una industria de proceso y los productos que procesan, son de la mayor importancia. Especialmente, cuando hay equipos que funcionan en forma *batch* o por lotes, o cuando los productos a fabricar y/o los recursos utilizados cambian a lo largo del tiempo.

Los modelos correspondientes suelen reflejar decisiones de alto nivel, que afectan al funcionamiento del conjunto de la factoría y se sitúan en los niveles de ERP (Enterprise Resource Planning) y MES (Manufacturing Execution Systems). La Figura 4 muestra un ejemplo de una planta donde varias unidades que procesan lotes actúan en paralelo, recibiendo productos que llegan en carros y consumiendo un conjunto de recursos comunes (vapor, carros, personal, etc.). Su funcionamiento se puede describir de diversas formas, incluyendo un simulador de eventos discretos, Redes de Petri, redes de actividades, diagramas de Gantt, etc.

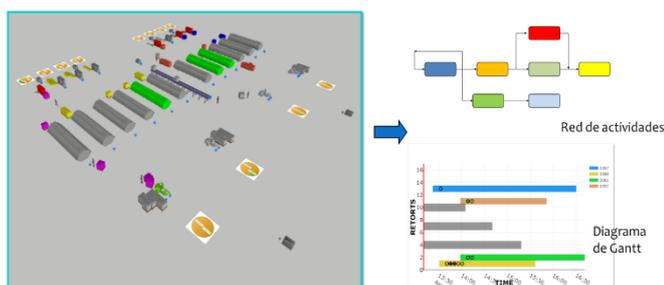


Figura 4: Ejemplo de proceso de eventos discretos y de su representación.

Para simular estos modelos existen entornos de simulación de eventos discretos, como Arena o Simio, que además proporcionan ayudas para el análisis estadístico de las ejecuciones y una interfaz animada para visualizar movimientos y funcionamiento de los sistemas. No obstante, estos entornos no contemplan la integración con los modelos (dinámicos) internos de los procesos/unidades para mantener coherencia, ni incorporan otros elementos para realimentar información tales como la comunicación con la capa de control, etc.

3.3 Modelos de procesos

El último elemento clave en la representación del sistema considerado hace referencia al funcionamiento interno de los equipos o unidades de proceso. Estos modelos relacionan los cambios de las variables manipuladas (acciones de los operarios) y en las variables de contorno (características de las materias primas, factores ambientales, etc.) con las respuestas de los procesos. Típicamente son modelos de conocimiento, compuestos de conjuntos de ecuaciones diferenciales y algebraicas que reflejan los balances de materia, energía, leyes físico-químicas, etc., las cuales pueden resolverse mediante un entorno de simulación continua. La gran ventaja de los modelos de conocimiento es la validez de las leyes físicas independientemente del entorno de operación y su capacidad de extrapolación a condiciones diferentes.

Desarrollar estos modelos consume bastante tiempo y requiere una cierta experiencia, aunque el uso de una biblioteca de componentes/modelos previamente desarrollados para el ámbito considerado puede facilitar dicha tarea. Las principales dificultades suelen estar ligadas a:

- La determinación de su alcance y estructura, lo que está relacionado con el establecimiento de hipótesis de comportamiento sobre las que se escriben las ecuaciones y la elección de los compromisos entre los objetivos para los que se desarrolla el modelo, el grado de detalle en la representación de la realidad y la facilidad de uso y rapidez de resolución del modelo.
- La existencia de aspectos o zonas del proceso en las que no se conocen los mecanismos internos o estos son muy complejos, de modo que resulta difícil desarrollar un modelo basado en leyes y conocimiento.
- El ajuste del comportamiento del modelo a la realidad, tanto en su inicialización como en la determinación de los valores de sus parámetros, y la fiabilidad y calidad de los datos experimentales disponibles, así como a los procedimientos de validación.

El primer punto puede conducir al desarrollo de varios modelos de distinta complejidad y, en todo caso, es probable que un mismo modelo deba ser usado en condiciones distintas para distintos usos, en el sentido de que sus variables de entrada (o variables conocidas) y las variables de respuesta o interés varían con dichos usos.

La gestión de distintos modelos o de distintas formulaciones entrada-salida de un modelo, requiere auténticos entornos de modelado que, junto a la funcionalidad básica de simulación dinámica, puedan manipular la causalidad computacional de los modelos para adaptarlos a su uso, tal como permiten hacer los modernos entornos denominados genéricamente “orientados a objetos o ecuaciones” (p.e. Dymola, EcosimPro, gProms, Jacobian, Aspen Custom Modeler, etc.). Por el contrario, las

herramientas más clásicas en el mercado requieren causalidad computacional fija, como los denominados lenguajes de simulación tipo bloques (Simulink, HYSIS, etc.), en los que las entradas y salidas de cada bloque son fijas o bien están orientados a simulación en estado estacionario.

El segundo punto puede llevar a buscar alternativas a los modelos de conocimiento y desarrollar submodelos de caja negra para las zonas difícilmente modelables. Dichos modelos describen las relaciones entre variables de estímulo y de respuesta sin considerar los mecanismos internos del proceso y se obtienen a partir de datos experimentales, frecuentemente mediante algún procedimiento de aprendizaje máquina (Ge *et al.*, 2017). Cuando se combinan con el resto del modelo de conocimiento (o modelos de caja blanca) dan lugar a los denominados modelos de caja gris o modelos híbridos, que a menudo son una excelente alternativa de modelado, ya que palian el problema de la pobre capacidad de extrapolación en modelos puramente de caja negra (Sansana *et al.*, 2021).

Una variante del problema de obtener modelos a partir de datos se refiere a la obtención de unos modelos a partir de otros para adecuarlos a determinados fines. Típicamente, el problema se refiere a la generación de modelos reducidos o subrogados a partir de un modelo de conocimiento complejo, sobre el que se realiza algún tipo de experimento virtual para obtener datos. Los modelos reducidos obtenidos se usan en aplicaciones como optimización o control, donde un modelo grande y complejo no sería eficiente.

En todo caso, la problemática de obtener modelos a partir de datos, extrayendo información de los mismos, determinando su estructura y parámetros, e imponiendo comportamientos compatibles con la física de los procesos fuera del rango de los datos utilizados (Pitarch *et al.*, 2019), es todavía un reto y tema de investigación. En particular, la selección de la estructura es un problema abierto, destacan contribuciones como la regresión simbólica con restricciones derivadas de conocimiento fundamental (Reinbold *et al.*, 2021).

Nótese que el uso del término híbrido puede ser confuso, en el sentido de que simplemente denota que hay dos entidades de naturaleza diferente y éstas pueden no ser solo modelos de caja blanca y caja negra para dar lugar a modelos grises, sino también, p.e., modelos que mezclan variables/decisiones continuas y discretas. A menudo, los procesos reales combinan dinámicas continuas con la existencia de eventos que generan discontinuidades (p.e. número de unidades en operación, cambios de las leyes físicas aplicables, etc.) o actuaciones puntuales (p.e. un controlador digital). En este sentido, los entornos de simulación han de soportar métodos numéricos para el tratamiento correcto de discontinuidades, representación de operaciones lógicas y tratamiento de eventos junto a modelos continuos para poder ser de utilidad en un DT, como es el caso de los entornos de simulación orientada a objetos antes mencionados.

La tercera dificultad mencionada de ajuste del comportamiento del modelo a la realidad reviste especial importancia en el contexto de un DT y será tratada a continuación en un apartado específico.

4. Actualización de modelos en tiempo real

Si el DT ha de responder a las consultas sobre el estado del sistema o recomendar acciones a tomar en tiempo real, es ob-

vio que sus modelos han de estar actualizados cuando se necesiten. Los modelos con información de la estructura (p.e. P&ID) y de eventos discretos (simulación discreta) son más sencillos de mantener, ya que puede que los cambios no sean muy frecuentes, o que se trate de datos actualizables directamente, o medidas realizables con la correspondiente instrumentación. Por el contrario, los modelos de los procesos cambian su estado interno continuamente, se ven sometidos a perturbaciones variables y sus parámetros pueden evolucionar en el tiempo, o bien el modelo cambia estructuralmente dependiendo de su modo de funcionamiento. Por ello, la problemática de la actualización se centra en ellos, tanto en estimar su estado en el instante presente y ajustar parámetros y perturbaciones en base a las medidas disponibles (las cuales no siempre son fiables) como en la posibilidad de desarrollar una especie de “plug & play” de las ecuaciones para reconfigurar un problema mixto entero sin que tenga que entrar un experto a reprogramar el código. Esto se concreta en la necesidad de incorporar junto a los modelos:

- Estimadores de estado y parámetros.
- Sistemas de reconciliación de datos.

Son bien conocidas las técnicas de estimación conjunta de estados y parámetros, tales como el Filtro Extendido de Kalman (EKF) y sus variaciones o los métodos de Estimación con Horizonte Móvil (MHE), siendo preferidos estos últimos por no necesitar linealizaciones y proporcionar estimados de las perturbaciones no medidas (Allgöwer *et al.*, 1999). De igual forma, existen métodos de reconciliación de datos (DR) que reconocen el hecho de que todos los instrumentos pueden tener errores y añaden como variables de decisión correcciones a las variables medidas (independientemente de si se consideran entradas o salidas del modelo) para obtener un conjunto de parámetros y variables estimadas del proceso coherentes con el conjunto de leyes físicas del modelo y lo más cercanas posibles a los valores medidos (Özyurt *et al.*, 2004). No obstante, los métodos de DR requieren disponer de información redundante en las medidas para ser válidos. Adicionalmente, en su aplicación hay un problema importante que mencionar: el de los instrumentos o medidas defectuosas, *gross errors* en la literatura en lengua inglesa (Arora and Biegler, 2001). Si éstas no se detectan o eliminan antes del procedimiento de reconciliación o estimación, el efecto es el de dispersión del error a otras variables, falseando el valor correcto. Por otra parte, si bien la reconciliación de datos puede aplicarse de forma relativamente directa a balances de materia, no ocurre lo mismo con componentes o balances de energía. Éstos dependen de datos de composición (a menudo incompletos) y de modelos experimentales de propiedades físicas (como la entalpía específica de una mezcla) con márgenes de error que pueden ser grandes.

El MHE y los métodos de reconciliación de datos se formulan como problemas de optimización de una función de coste que penaliza los errores entre las respuestas del modelo y las experimentales, sujeta a las restricciones impuestas por el modelo del sistema y otras operativas, siendo las variables de decisión los parámetros o perturbaciones a estimar (y sesgo de los datos medidos en el caso de DR) (Sarabia *et al.*, 2012). Otro problema significativo en su aplicación está relacionado con la presencia de mínimos locales, usual en sistemas no lineales, y con la dimensionalidad, particularmente cuando se

trabaja con modelos dinámicos en sistemas de gran dimensión o con ecuaciones en derivadas parciales (PDE).

Este último aspecto limita las posibilidades de usar métodos de optimización globales, bien sean deterministas o evolutivos, y presenta un reto de cara a la actualización de modelos en tiempo real. La solución puede encontrarse en la aplicación de técnicas de optimización distribuidas donde se puedan ajustar independientemente los parámetros de un conjunto de submodelos bajo la coordinación de un problema maestro, que fuerce el ajuste a unos mismos valores de los parámetros o de medidas comunes a los mismos, análogo a las técnicas de descomposición de Benders en problemas de variables compartidas.

5. Herramientas

El otro aspecto clave de un DT es el uso de los modelos e información para la toma de decisiones, posiblemente por múltiples actores que pueden acceder a esa información coherente y actualizada. Para ello, en función del aspecto específico involucrado, deben usarse diversas funcionalidades (software) integradas en el DT o conectadas con él. Entre ellas podemos citar:

- Análisis de datos.
- Simulación predictiva en línea.
- Optimización en tiempo real.
- Monitorización del estado de los equipos.
- Entrenamiento de personal.

La Figura 5 presenta un resumen de estas funcionalidades de un DT, siendo una importante tarea mantener la coherencia e interacción entre los distintos módulos.

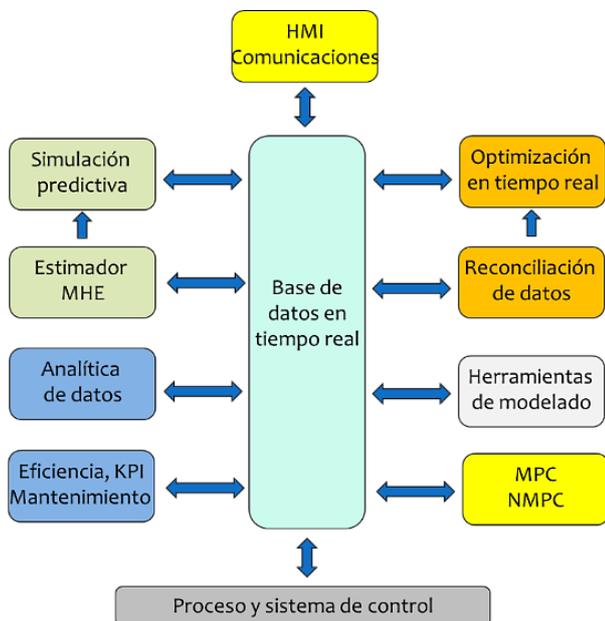


Figura 5: Módulos funcionales de un DT.

5.1 Análítica de datos

Los algoritmos de análisis de datos son fundamentales a la hora de determinar nuevas correlaciones entre variables y extraer información de fuentes diversas. Ello está en la base de la construcción de modelos, así como en la estimación de valores desconocidos de algunas variables a partir de otras medidas, lo que se conoce como sensores software o virtuales (Lee *et al.*,

2018). Un DT facilita el análisis al disponer de datos actualizados y de diversa naturaleza que pueden fundirse y examinarse bajo diversos ángulos. Este es otro campo abierto de investigación, que va más allá de las técnicas de correlación temporal, PCA o redes neuronales (NN) clásicas, hacia otros desarrollos como por ejemplo NN convolucionales (CNN), Graph NN, métodos de descomposición de modos dinámicos (DMD) u otros (Jiang *et al.*, 2021; Qin *et al.*, 2021).

5.2 Simulación predictiva en línea

Quizás la funcionalidad más específica de un DT (Galan *et al.*, 2019), que responde al deseo de muchos operarios en salas de control de disponer de una simulación dinámica del proceso a la que poder consultar qué pasará si hacen una determinada acción a partir de la situación actual, ver la predicción correspondiente y evaluar así la corrección y efectos de la misma, como aparece reflejado en la Figura 6. Para que el resultado sea realista es obvio que se necesita partir de un modelo con unas condiciones iniciales iguales a las del proceso, de ahí la importancia de disponer de modelos actualizados o actualizables en tiempo real e información correcta del proceso, lo que se consigue con los estimadores de estado y los métodos de reconciliación de datos ya mencionados. Para el adecuado uso de esta funcionalidad es importante disponer de una buena interfaz hombre-máquina (HMI) con la simulación, que permita especificar cómodamente las acciones presentes y futuras a efectuar en el horizonte de predicción.

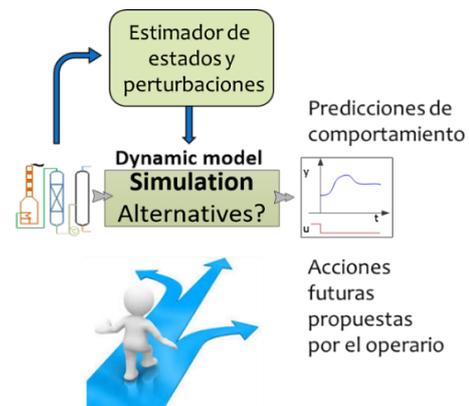


Figura 6: Ensayo de alternativas de operación en tiempo real usando simulación predictiva en línea.

5.3 Optimización en tiempo real

La optimización en tiempo real (RTO) utiliza los modelos actualizados y algoritmos de optimización para determinar las mejores condiciones de operación de un proceso o la programación (*scheduling*) de la producción (Darby *et al.*, 2011). Tradicionalmente está basada en modelos estacionarios y algoritmos de optimización no lineal, además de módulos de tratamiento y reconciliación de datos para la actualización de modelos, ejecutándose periódicamente y usando sus resultados como consignas en el escalón inferior de control de la producción o recomendaciones a los operarios. Aquí figurarían también los controladores predictivos (MPC o NMPC) que trabajarían con modelos simplificados obtenidos a partir de datos experimentales, o con modelos subrogados. No obstante, este planteamiento está variando ante la necesidad de tener en cuenta la dinámica de los procesos y la producción en tiempo

real, así como la necesidad de adaptarse rápidamente a los cambios y demandas externas. En este sentido, se plantean, tanto la necesidad de nuevas formulaciones en la actualización de modelos ya comentadas, como la implantación de métodos de integración del RTO y el MPC (de Prada *et al.*, 2017) en lo que se conoce como MPC económico (eMPC) (Engell and Harjunkski, 2012) o formulaciones recientes de *scheduling* en línea (Palacín *et al.*, 2020).

Por otra parte, el éxito en la aplicación de la optimización requiere afrontar dos problemas clave:

- La presencia de incertidumbre, tanto del entorno como en los modelos respecto al proceso real.
- La dimensionalidad de los problemas para resolverlos en tiempo real.

La incertidumbre en los valores actuales de estados, parámetros o perturbaciones se ha tratado normalmente con métodos de estimación. Sin embargo, cuando tomamos decisiones para aplicar en el futuro, no estamos seguros de los valores que tomarán ciertas perturbaciones, ni de la capacidad de predicción determinista que ofrecen nuestros modelos acerca del comportamiento futuro del sistema real. Por ejemplo, si el estado es “conocido” y los errores de los modelos se concentran en algunos parámetros, éstos pueden corregirse con las técnicas de estimación mencionadas. No obstante, si existen errores estructurales entre el modelo y la realidad, los resultados de la predicción/optimización con el modelo no coincidirán con la respuesta del proceso ante las mismas acciones aplicadas.

Por ello, un planteamiento realista de la optimización de procesos debe considerar explícitamente la incertidumbre incorporando métodos para tratarla. De hecho, la generalización de este problema (incertidumbre en el estado actual, en los sensores, en el modelo de predicción y en las perturbaciones externas) donde, además, se busca conseguir la operación más óptima en un tiempo finito es lo que se conoce en la literatura en lengua inglesa por “Partially Observable Markov Decision Process” (POMDP) (Smallwood and Sondik, 1973). Por tanto, en un problema de optimización POMDP aparece un compromiso entre exploración y explotación (control dual) que, en general, sigue siendo un problema abierto debido a su complejidad computacional, incluso en muchos casos particulares.

Entre los que abordan la incertidumbre proceso-modelo se puede citar el enfoque de Extremum-Seeking (ES) (Ariyur *et al.*, 2003), Modifier Adaptation (MA) (Marchetti *et al.*, 2016) o métodos probabilísticos Bayesianos (Bernardo, 2011). En todos éstos se han hecho avances significativos recientemente (del Rio-Chanona *et al.*, 2021; Oliveira-Silva *et al.*, 2021), existiendo formulaciones que aprovechan datos durante los transitorios y se integran con eMPC.

Por otra parte, cuando se considera la variabilidad futura de algunas variables o distintas alternativas de comportamiento, los métodos de optimización estocástica multietapa han demostrado su utilidad (Birge and Louveaux, 2011). Éstos consideran simultáneamente varios escenarios con distintas probabilidades e incluyen variables (de recurso o de segunda etapa) asociadas a los mismos, que permitirían ajustar las acciones futuras a la realización concreta de la incertidumbre que tenga lugar, tal como se ve en la Figura 7. De esta forma, aumentan los grados de libertad y permiten obtener soluciones robustas, en el sentido de cumplir las restricciones para todos los esce-

narios, pero menos conservadoras que las obtenidas con enfoques robustos del tipo peor caso. Por otra parte, pueden incorporar objetivos formulados en términos de valor esperado o minimizar el riesgo asociado con la probabilidad de ocurrencia de determinados escenarios.

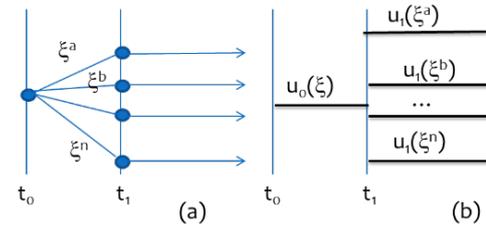


Figura 7: a) Posibles evoluciones del sistema en función de la realización de la incertidumbre. b) Decisiones de primera etapa y variables de recurso para cada escenario.

Igualmente, hay avances significativos siguiendo los enfoques de aprendizaje por refuerzo y gestión de la incertidumbre usando algoritmos iterativos que involucran filtros de partículas, muestreo selectivo y control predictivo con modelos probabilísticos (Mesbah, 2018). No obstante, tanto estos enfoques como los anteriores (aún siendo casos particulares de POMDP) adolecen de un problema de dimensionalidad, y su coste computacional suele ser excesivo para aplicarlos a escala industrial o para aplicaciones con requerimientos de tiempo real.

Por ello, cada vez cobra más relevancia la investigación en incorporar métodos de optimización distribuida a los problemas anteriores (modelado, estimación de estados, discrepancia modelo-proceso, optimización estocástica) (Masooleh *et al.*, 2021; Linderoth and Wright, 2003; Boy *et al.*, 2008) así como en la resolución de problemas de optimización de gran escala en los que se requieren soluciones en tiempo real.

Un ejemplo de arquitectura típica de optimización distribuida se ve en la Figura 8, con un problema maestro de coordinación y N subproblemas de optimización que pueden resolverse en paralelo acelerando su ejecución.

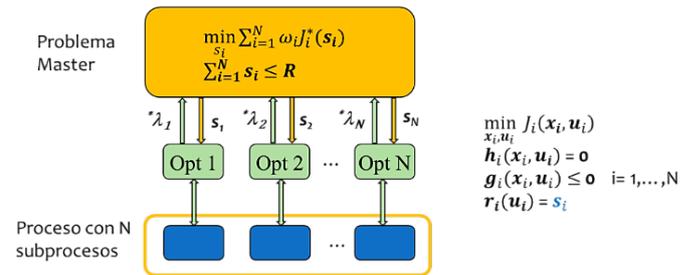


Figura 8: Ejemplo de arquitectura de optimización distribuida con un problema maestro y N optimizaciones de subproblemas en paralelo.

5.4 Monitorización de equipos y entrenamiento de personal

Otra funcionalidad importante de un DT es lo que podríamos llamar determinación del estado de los equipos, lo que se conoce como *Asset Management* o *Health* en la literatura inglesa, y que comprende un conjunto de funciones de supervisión de los mismos. Típicamente, cálculo de KPIs (*Key Performance Indicators*) para seguimiento y ayuda en monitorizar eficiencia, detección de averías y planificación del mantenimiento predictivo en función del estado.

Finalmente, es obvio que las simulaciones y el entorno pueden usarse para entrenar personal en distintos aspectos del proceso y del DT, aunque conviene indicar que un simulador de entrenamiento de personal debe incluir muchos otros aspectos tanto de modelado, incorporando situaciones de averías o mal funcionamiento de los procesos, como de gestión del entorno (Fracaro *et al.* 2022).

6. Aplicación en una red de hidrógeno

En los últimos años, el hidrógeno ha pasado de ser un simple servicio a ser un producto relevante en las actuales refinerías de petróleo debido a varios factores. Primero, la legislación actual mucho más restrictiva sobre el contenido de azufre, nitrógeno, aromáticos, etc. en productos derivados del petróleo ha requerido el uso de nuevos procesos donde las fracciones del crudo se tratan en unidades desulfuradoras mediante reacciones de hidrotratamiento catalítico (HDT) que consumen hidrógeno para eliminar el azufre. Segundo, el beneficio económico que conlleva la conversión de fracciones pesadas de crudos en productos más ligeros mediante la rotura de las cadenas con alto peso molecular en las unidades de craqueo catalítico, que también necesita hidrógeno para llevarse a cabo. Por último, la mejora en la eficiencia de ciertos motores de combustión aumentando el octanaje de las gasolinas que utilizan, ha extendido el uso de unidades de reformado catalítico con platino (“*platformer*”) que generan hidrógeno como subproducto.

Por ello, la gestión del hidrógeno en las refinerías se ha vuelto cada vez más importante y crítica, teniendo en cuenta además su elevado coste de producción y la dificultad de su almacenamiento, siendo necesario satisfacer un balance global entre lo que se produce y lo que se consume en cada instante.

Se ha tomado como proceso de referencia para su estudio la refinería de Petronor perteneciente a Repsol y situada en el norte de España (Muskiz, Bilbao). Las diferentes fracciones del crudo (gasóleo, gasolina, naftas, etc.) que se obtienen en las columnas de destilación se procesan posteriormente en una

serie de unidades. Desde el punto de vista del hidrógeno, tiene unidades de craqueo catalítico (BD3, F3 y BD6) que transforman hidrocarburos pesados en hidrocarburos más ligeros, y también unidades desulfuradoras (D3, G1, G2, G3, G4, HD3, N1, N2, NC6, NF3 y RB4) que eliminan el azufre de los hidrocarburos para poder ser comercializados. Ambos tipos de unidades utilizan hidrógeno para que tengan lugar las correspondientes reacciones en los reactores.

El hidrógeno de alta pureza se produce en unos hornos reformadores de las unidades H3 y H4 a diferentes purezas, 93-95% y 99.9% respectivamente. Por otro lado, hay dos unidades de reformado catalítico, P1 y P2 que generan como subproducto hidrógeno a una pureza de 70-80%. La red de hidrógeno de la refinería está formada por un conjunto extenso de tuberías y colectores de diferentes tamaños, operando a diferentes presiones, que conectan las unidades productoras con las consumidoras (Figura 9) y por las que circula el H₂ en forma gaseosa. También dispone de un colector de baja pureza (CBP) que se alimenta de los excesos de H₂ que no se ha consumido en las reacciones de ciertas unidades y que, debido a su pureza 60-70 %, puede ser utilizado en otras unidades consumidoras.

Por tanto, desde el punto de vista de la red de hidrógeno, las unidades consumidoras pueden ser alimentadas con hidrógeno proveniente de diferentes fuentes a diferentes purezas, que es parcialmente consumido en los reactores. La fracción no consumida puede ser reutilizado en la misma unidad (en algunos casos previa purificación en membranas) y/o en otras unidades a través del colector de baja pureza CBP. El resto de hidrógeno (de ya muy baja pureza) es enviado a la red de fuel gas para ser usado como combustible en los hornos de la refinería.

Todas las plantas y la propia red se opera desde las salas de control de la refinería que están equipadas con un sistema de control distribuido (DCS) que implementa reguladores básicos, de presión, caudal, temperatura, etc. Además, la mayoría de las plantas incorporan también controladores predictivos basados en modelos (MPC), en concreto el DMC plus.

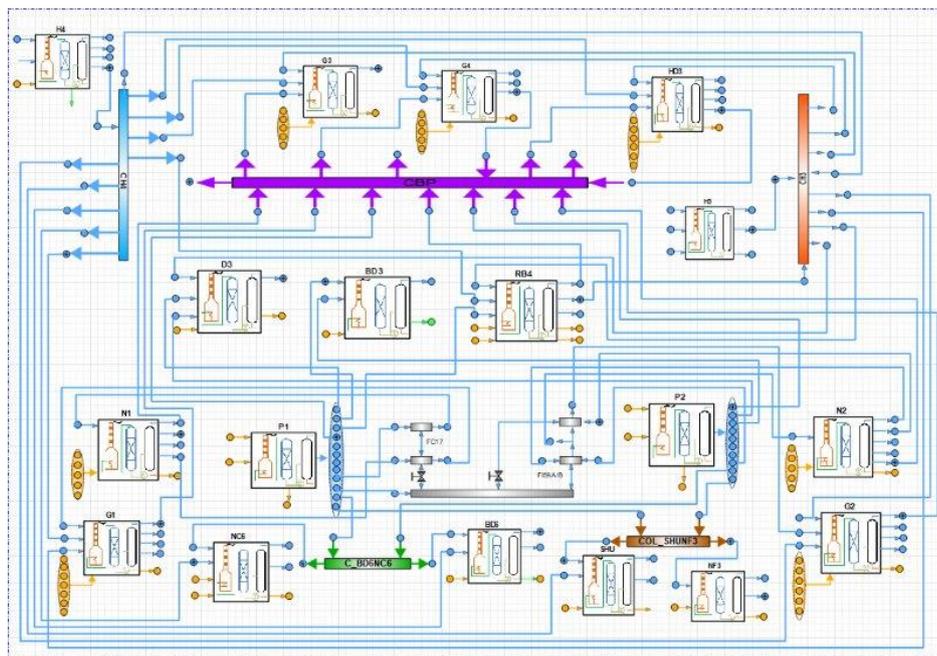


Figura 9: Red de hidrógeno de la refinería de Petronor con todas las plantas involucradas sus conexiones. Diagrama para simulación dinámica en EcosimPro.

La gestión global pasa por ajustar la producción de hidrógeno a la demanda cambiante de necesidades e implica los siguientes objetivos de mayor a menor importancia:

- Distribuir el H₂ fresco disponible y el recirculado (dentro de una unidad y entre unidades) para que se satisfagan las demandas en los reactores de todas las plantas. Un defecto de hidrógeno puede suponer un peligro para los catalizadores usados en los reactores que son sumamente costosos, disminuyendo drásticamente su vida útil.
- Cumplir en la medida de lo posible los objetivos de producción (tratamiento) de hidrocarburo especificados en la planificación de la refinería. La idea subyacente es incrementar siempre la producción de hidrocarburos al máximo posible. Un defecto de hidrógeno no permite procesar todas las cargas de hidrocarburo, implicando una reducción económica al tener que bajar la producción.
- Balancear el hidrógeno producido con el consumido para evitar pérdidas de hidrógeno a la red de fuel gas. A pesar de que los excesos de hidrógeno se usan como combustible en hornos, hay que destacar primero, que el hidrógeno no es un buen combustible y, segundo, que el coste económico de producción de hidrógeno a purezas de 95-99.9% es mucho mayor que el beneficio como combustible.

En esta gestión, además hay que tener en cuenta numerosas restricciones de operación, tanto en las unidades productoras como consumidoras; las dinámicas de las unidades productoras, que implican un tiempo sustancial para aumentar o disminuir producción, por lo que el ajuste de la producción a la demanda debe ser anticipado; y, finalmente, la frecuencia en el cambio de la demanda en las unidades consumidoras.

Además, este tipo de procesos cuenta con una elevada incertidumbre que proviene fundamentalmente de:

- Los cambios en el consumo de hidrógeno en los reactores de las unidades desulfuradoras. Este consumo depende no solo de la cantidad y tipo de hidrocarburo a tratar, sino también de su contenido de azufre y, por tanto, de las especificaciones de azufre en el producto final.
- El uso de placas de orificio para medir caudales de gas, que es muy habitual en la industria, pero que para medir corrientes de hidrógeno tiene algún inconveniente. Las placas de orificio miden caudal volumétrico en unidades Nm³/h y se diseñan para unas condiciones de particulares de la corriente (presión, temperatura y peso molecular). Si las condiciones reales de la corriente cambian respecto de las de diseño, entonces la medida debe ser compensada con un factor que depende de los valores de diseño y también de los valores de operación de la corriente. Además, el peso molecular de las corrientes cambia sustancialmente con pequeñas variaciones de la cantidad de impurezas presentes debido a que el H₂ tiene un peso molecular de 2 g/mol pero las impurezas, que suelen ser metano, etano y propano (CH₄, C₂H₆ y C₃H₈) tienen pesos moleculares de 16, 30 y 44 g/mol.
- La gran ausencia de medidas en línea en muchas corrientes, tales como pureza de hidrógeno y peso molecular, que permitan caracterizarlas adecuadamente. También, es poco habitual la presencia de instrumentación redundante, lo que complica el conocimiento real del estado del proceso en caso de averías de instrumentación, cosa bastante frecuente en los analizadores de pureza.

6.1 Gemelo digital

Fruto de un estudio exhaustivo del proceso junto con el personal de la refinería, se ha desarrollado e implementado en planta un gemelo digital con varias funcionalidades, tal y como se muestran en la Figura 10.

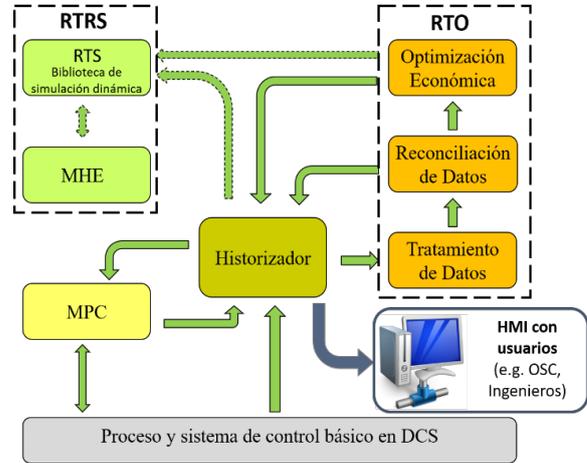


Figura 10: Gemelo digital de la red H₂. OSC: operador de sala de control; RTS: simulación en tiempo real; RTRS: simulación reconciliada en tiempo real

Modelos. El bloque relacionado con RTO, que incluye el tratamiento de datos medidos y la resolución de un problema de reconciliación de datos y de optimización de la operación en línea, se basa en un modelo estacionario (Sarabia *et al.*, 2012). Éste incluye 295 corrientes de gas, 102 corrientes líquidas de hidrocarburo, algunas de ellas incorporando gas disuelto, 268 variables de tipo caudal (172 de ellas medidas), 92 variables de tipo pureza (19 de ellas medidas), 16 variables peso molecular de los ligeros generados en los reactores, 35 variables peso molecular de corrientes y 40 coeficientes relacionados con la solubilidad del gas y del H₂ en el hidrocarburo.

El modelo es además de naturaleza híbrida, ya que, junto a leyes fundamentales como balances de masa, incorpora relaciones experimentales obtenidas de los modelos dinámicos utilizados en los reguladores DMC+ existentes en la planta (de Prada *et al.*, 2017). Esto fue necesario debido a la dificultad de obtener la información de diseño de la planta completa, que ha sufrido varias modificaciones desde su puesta en servicio. Además, con este modelo se garantiza la coherencia en las decisiones entre la capa RTO y la de control.

Para el bloque RTRS de la Figura 10 se ha desarrollado una simulación dinámica de la red y del conjunto de plantas involucradas en el entorno de modelado EcosimPro/PROOSIS (Galan *et al.*, 2019) (véase Figura 11), cuyo estado se actualiza en tiempo real a partir de los resultados de la reconciliación de datos y de algoritmos MHE integrados (Galan *et al.*, 2021). No obstante, la naturaleza dinámica de los modelos aumenta considerablemente la dimensión de cualquier problema que se quiera abordar, y por ello la funcionalidad de simulación dinámica en línea sólo se han desarrollado para una parte reducida de la planta: tres unidades desulfuradoras, tres colectores y dos unidades de producción de H₂.

Actualización de modelos en tiempo real. Se concreta en la necesidad de incorporar junto a los modelos:

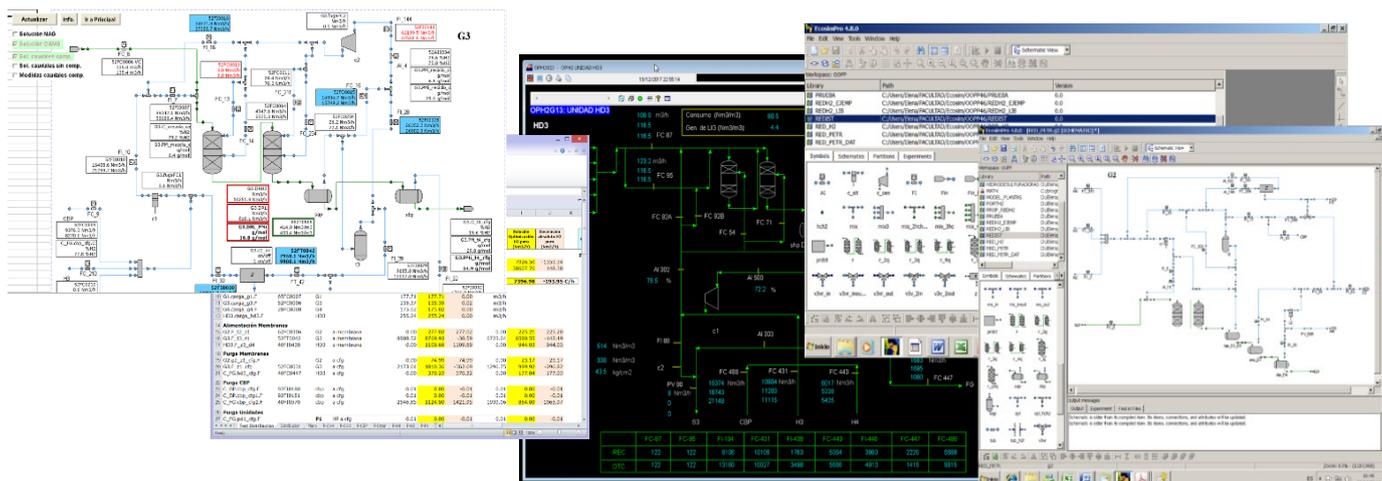


Figura 11: Distintas maneras de visualizar la información: interfaz en Excel (izq), pantallas del PI (centro) y biblioteca de modelos en EcosmPro (dcha).

- **Sistema de reconciliación de datos.** Permite estimar las magnitudes desconocidas, tales como, consumos, purezas, pesos moleculares; eliminar inconsistencias entre medidas y, por tanto, encontrar los valores para todas las variables que caracterizan la red siendo coherente entre ellos y con las medidas disponibles; y calcular índices de comportamiento del proceso.
- **Adaptación del modelo** a las condiciones cambiantes de operación del proceso. Una parte del modelo se actualiza al haberlo formulado mediante una superestructura con variables enteras y continuas, dando lugar a un problema de programación no lineal mixto-entera (MINLP), y otra parte del modelo se actualiza en función de las medidas de planta que permiten caracterizar unívocamente parte de la operación actual.
- **Estimadores de estado y parámetros.** A pesar de que el problema de reconciliación de datos permite obtener el valor de muchos parámetros, cuando se usa la herramienta de simulación predictiva en línea con modelos dinámicos, es necesario además estimar el valor de los estados desconocidos. Para ello se utilizó la técnica MHE.

Herramientas. Se han desarrollado las siguientes funcionalidades software integradas en el DT o conectadas con él (Galán Prado, 2021):

- **Análisis de datos.** Se ha desarrollado un módulo básico de comprobación de datos erróneos e inconsistencias.
- **Optimización en tiempo real.** Trata de optimizar la operación de la red. Es decir, distribuir mejor el hidrógeno disponible para alcanzar los objetivos de producción de hidrocarburos maximizando la carga de hidrocarburo a procesar y minimizando al mismo tiempo la generación de hidrógeno fresco o las pérdidas de hidrógeno. El problema incorpora restricciones adicionales para evitar cambios bruscos de puntos de operación. El RTO mantiene el estado de funcionamiento o parada de la planta y el estado actual de la estructura de la red, pensando en que estas decisiones están impuestas por motivos de mantenimiento o producción global.
- **Visualización de la información** mediante la interfaz de la propia aplicación e integrando los resultados en el sistema

PI de la planta. Así, todo el personal puede acceder a información relevante sobre los esquemáticos del proceso.

- **Simulación predictiva en línea.** Permite ayudar a la toma de decisiones de los operadores de la planta al incorporar un modelo dinámico del proceso (coherente con los modelos estacionarios utilizados en la reconciliación de datos y RTO) y mantenerse actualizado con información en línea.

La reconciliación de datos y la optimización de la operación en tiempo real se formularon como problemas MINLP de gran escala, incluyendo más de 4400 variables y 4700 restricciones de igualdad y desigualdad, resolviéndose en el entorno GAMS (General Algebraic Modeling System) usando IPOPT (Interior Point Optimizer) como algoritmo de optimización.

Implementación. La interfaz con los usuarios se ha programado en Visual Basic en el entorno de MS Excel en Windows, permitiendo dos modos de funcionamiento: i) fuera de línea, que permite utilizar la interfaz para visualizar resultados en forma de gráficas, tablas, esquemáticos, etc., véase Figura 11 a); ii) en línea, accediendo a la información del proceso almacenada en el sistema PI de la refinería de manera automática cada 2 horas, realizando el tratamiento de los datos medidos y ejecutando el entorno de optimización de GAMS donde, con el modelo matemático del proceso, se resuelven los problemas de optimización asociados a la reconciliación de datos y la optimización económica. Los resultados se devuelven a Excel, se almacenan y, debido a la enorme cantidad de datos generados, solo una parte de ellos (los más relevantes) se escriben en el sistema PI para estar disponibles en línea para todo el personal.

Nótese que el punto central del gemelo digital desarrollado es la base de datos del sistema PI, desde donde se lee de manera automática toda la información necesaria y donde se escriben los principales resultados que se deseen mostrar a todo el personal de la refinería. No obstante, el resto de información necesaria pero proveniente de otros sistemas todavía debe ser introducida manualmente en el gemelo digital.

6.2 Problemática encontrada

A lo largo del desarrollo e implementación del gemelo digital se han identificado numerosos problemas, entre ellos:

- Adaptar los modelos a la estructura cambiante de la planta (incorporación de nuevas unidades, tuberías, instrumentación, etc.) y al estado del proceso, en concreto a los modos de operación y funcionamiento de las plantas. Especialmente cuando surgen nuevos modos de funcionamiento.
- Acceso a fuentes de información no convencionales, como ordenes de producción, planificación estratégica, costes económicos de los productos y subproductos, donde la información está en soportes muy diferentes: papel, documentos digitales, bases de datos diferentes, etc.
- Se genera mucha información, que requiere de herramientas especializadas para manejar un número tan elevado de variables de forma eficiente e interfaces de usuario avanzadas para presentarla adecuadamente, teniendo en cuenta además las diferentes necesidades de cada usuario.
- Multitud de parámetros de configuración que requieren de un conocimiento importante de las herramientas que se están utilizando (optimización, estimación, análisis de datos, etc.).
- Cómo resolver de manera eficiente la integración y la comunicación entre las distintas herramientas desarrolladas alrededor del gemelo digital.
- Problemas en inicialización y manejo de la simulación dinámica en la herramienta de simulación predictiva en línea, debido al elevado número de unidades, variables, etc.

7. Situación actual y conclusiones

La actual expansión de los gemelos digitales es el resultado de la evolución del uso de modelos y datos en un entorno en el que la disponibilidad de éstos ha aumentado notablemente, a la par que la capacidad y el interés por los mismos. No obstante, ni el mero incremento cuantitativo ni el habitual y adánico cambio de nombre para técnicas mayoritariamente usadas con anterioridad han supuesto la solución de la mayoría de las dificultades técnicas que todavía existen, aunque comercialmente ya se presente como un producto plenamente operativo.

Podemos citar algunos de los obstáculos que existen para la implementación y uso de los gemelos digitales:

- El término *Digital Twin* no tiene una única acepción y se utiliza para nombrar tecnologías diferentes. Se podría decir que no hay una definición clara más allá de una vaga idea de representación digital conectada a los datos de la entidad física. A partir de aquí, el soporte físico e informático sobre el que se implementa la comunicación y almacenamiento de los datos; que se trate de un sistema de monitorización avanzado o que se utilicen además modelos de datos, primeros principios o ambos; que tenga un mayor o menor número de capas de información; las diferentes acciones que se puedan realizar sobre toda la infraestructura anterior o la forma y capacidades de la interfaz de usuario, configuran gemelos digitales de complejidad y características muy diferentes.
- Si nos referimos al ideal que se suele anunciar, desarrollar y utilizar, un gemelo digital es costoso o muy costoso. Consecuencia de la multiplicidad citada en el punto anterior, no existe un estándar que facilite la distribución de la tarea y costes de construir un gemelo digital, teniendo que realizar el desarrollo casi desde cero, probablemente atándose a un sistema propietario que condicionará su evolución o cambios en el futuro. La operación tampoco es sencilla y requiere de personal especializado para su mantenimiento. Piénsese que el éxito de la NASA para salvar la misión del Apollo 13 fue

posible no sólo por los simuladores que tenían, sino fundamentalmente por la alta capacidad técnica de las personas que los diseñaron y operaron.

- En un plano distinto, el ejemplo de *Building Information Modeling* (BIM) en edificios señala el camino para la racionalización y abaratamiento de los gemelos digitales: estándares que permiten que cada actor desarrolle el modelo de la parte que le corresponde y que puede añadirse en el modelo común del edificio. Esta idea de componibilidad es crítica, pero puede conducir a técnicas de sistemas distribuidos, cosimulación, etc., que aún no están resueltos satisfactoriamente. Uniendo el problema del coste y la complejidad, conviene evaluar qué funciones de un gemelo digital son realmente útiles y abordables, para lo que de nuevo resultaría apropiado el concepto de sistema compuesto por diferentes elementos que se añaden con facilidad a una infraestructura básica.
- Los sistemas distribuidos no sólo aparecen debido a la composición de las partes de un proceso. Hay sistemas que de forma natural se constituyen por elementos en los que la conexión, por su tamaño o complejidad, eleva el problema a otra escala. Y de nuevo nos encontramos con que las técnicas habituales (en estimación, control, optimización) no son adecuadas para esta dimensión.

También vale la pena mencionar que persisten dos problemas clásicos en el uso de modelos:

- En primer lugar, el de la observabilidad incompleta. Aunque ciertamente el nivel de instrumentación ha ido incrementándose con el tiempo, comparando simplemente con el modelo, sigue habiendo muchas variables que no se miden, siendo, en el mejor de los casos (y desde luego no en todos) estimadas a partir de otras utilizando propiedades y parámetros imprecisos. Así, el gemelo digital es una versión parcial de la planta, y ello tiene implicaciones serias en la toma de decisiones y en el uso en general de esta herramienta, para la que sería necesario precisar sus limitaciones.
- En segundo, las discrepancias entre realidad y modelo. Es bien sabido que cualquier modelo es una abstracción del mundo real, pero cuando surgen altas discrepancias entre ambos es difícil atribuir la causa. El caso típico es el de un modelo que se ejecuta en paralelo con la planta, una versión del gemelo digital. ¿A qué se puede deber una diferencia entre predicción y medidas? ¿A un cambio en la planta (quizás el inicio de un incidente)? ¿A un modelo incompleto? ¿O a un fallo en la medida? Ya con un modelo teórico de primeros principios es difícil determinarlo, pero en modelos obtenidos a partir de datos, que dependen de la experiencia anterior, con escasa capacidad predictiva o interpretativa, el problema se agrava. En el momento en que no sabemos dónde estamos, la función fundamental de ayuda en la toma de decisiones del gemelo digital queda en suspenso.

Los gemelos digitales son una realidad y lo serán más en el futuro, pero nos encontramos en la fase de expectativas sobredimensionadas del ciclo de Gartner, donde el marketing presenta una versión edulcorada pero ficticia de lo que realmente es posible, técnica y económicamente, en este momento. Queda un camino donde se deben investigar problemas como los descritos y llegar a un acuerdo, estándares, incluso de facto, que permitan la participación de todos los agentes en la construcción de estas herramientas a partir de la composición de distintos módulos en una jerarquía de niveles.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido realizado parcialmente gracias al apoyo del MICINN de España a través del proyecto “Control y Optimización de planta completa integrados para Industria 4.0” (InCO4In) con referencia PGC2018-099312-B-C31.

Referencias

- Allgöwer, F., Badgwell, T.A., Qin, J.S., Rawlings, J.B., Wright, S.J. 1999. Nonlinear Predictive Control and Moving Horizon Estimation — An Introductory Overview BT. In: Frank, P.M. (Ed.), *Advances in Control*. Springer, London, pp. 391–449. DOI: 10.1007/978-1-4471-0853-5_19
- Arora, N., Biegler, L.T., 2001. Redescending estimators for data reconciliation and parameter estimation. *Computers & Chemical Engineering*, 25, 1585–1599. DOI: 10.1016/S0098-1354(01)00721-9
- Aveva, 2020. Enabling the Digital Twin through Unified Engineering [WWW Document]. Blog. URL: <https://www.aveva.com/en/perspectives/blog/enabling-the-digital-twin-through-unified-engineering/> (accedido 2.7.22).
- Bernardo, J. M., 2011. Modern Bayesian Inference: Foundations and Objective Methods. In: Bandyopadhyay, P. S. et al. (Ed.) *Handbook of the Philosophy of Science, Philosophy of Statistics*, North-Holland, 7, pp 263–306. DOI: 10.1016/B978-0-444-51862-0.50008-3
- Birge, J. R., Louveaux, F., 2011. *Introduction to stochastic Programming*. Springer Verlag, Series in Operations Research and Financial Engineering.
- Boss, B., Malakuti, S., Lin, S.W., Usländer, T., Clauer, E., Hoffmeister, M., Stojanovic, L., 2020. Digital Twin and Asset Administration Shell Concepts and Application in the Industrial Internet and Industrie 4.0. URL <https://www.plattform-i40.de/IP/Navigation/EN/Home/home.html>
- Bröcker, S., Benfer, R., Bortz, M., Engell, S., Knösche, C., Kröner, A., 2021. Process Simulation – Fit for the future? DEHEMA e.V.
- Darby, M. L., Nikolaou, M., Jones, J., Nicholson, D., 2011. RTO: An overview and assessment of current practice. *Journal of Process Control*, 21, 874–884. DOI: 10.1016/j.jprocont.2011.03.009
- de Prada, C., Sarabia, D., Gutierrez G., Gomez, E., Marmol, S., Sola, M., Pascual, C., Gonzalez, R., 2017. Integration of RTO and MPC in the hydrogen network of a petrol refinery. *Processes*, 5(3). DOI: 10.3390/pr5010003
- del Rio Chanona, E. A., Petsagkourakis, P., Bradford, E., Graciano, J. A., & Chachuat, B., 2021. Real-time optimization meets Bayesian optimization and derivative-free optimization: A tale of modifier adaptation. *Computers & Chemical Eng.*, 147, 107249. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2021.107249
- Engell, S., Harjunkski, I., 2012. Optimal operation: Scheduling, advanced control and their integration. *Computers & Chemical Engineering*, 47, 121–133. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2012.06.039
- Fracaro, S. G., Glassey, J., Bernaerts, K., Wilk, M., 2022. Immersive technologies for the training of operators in the process industry: A Systematic Literature Review. *Computers & Chemical Engineering*, 107691. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2022.107691
- Galán, A.S., 2021. Simulation and optimization methods as decision support tools for operation of oil refinery hydrogen networks. Tesis Doctoral, Universidad de Valladolid. DOI: 10.35376/10324/46435
- Galan, A., de Prada, C., Gutierrez, G., Sarabia, D., Gonzalez, R., 2019. Predictive Simulation Applied to Refinery Hydrogen Networks for Operators’ Decision Support. *IFAC-Papers On Line* 52, 862–867. DOI: 10.1016/j.ifacol.2019.06.170
- Galan, A., de Prada, C., Gutierrez, G., Sarabia, D., Gonzalez, R., 2021. Real-time reconciled simulation as decision support tool for process operation. *Jour. of Process Control*, 100, 41–64. DOI: 10.1016/j.jprocont.2021.02.003
- Ge, Z., Song, Z., Ding, S. X., Huang, B., 2017. Data mining and analytics in the process industry: The role of machine learning. *IEEE Access*, 5, 20590–20616. DOI: 10.1109/ACCESS.2017.2756872
- Griewes, M., 2019. Virtually Intelligent Product Systems: Digital and physical twins. In: S. Flumerfelt, et al. (Ed.), *Complex systems engineering: Theory and Practice*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, Ch. 7, pp. 175–200. DOI: 10.2514/5.9781624105654.0175.0200
- Jiang, S., Xu, Z., Kamran, M., Zinchik, S., Paheding, S., McDonald, A. G., Bar-Ziv, E., Zavala, V. M., 2021. Using ATR-FTIR spectra and convolutional neural networks for characterizing mixed plastic waste. *Computers & Chem. Eng.*, 155, 107547. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2021.107547
- KBC, 2021. Digitalization Manifesto. Now is the Time. URL: https://www.kbc.global/uploads/files/whitepapers/KBC%20Digitalization%20Manifesto_US.pdf (accedido 8.3.22)
- Lee, J. H., Shin, J., Realf, M. J., 2018. Machine learning: Overview of the recent progresses and implications for the process systems engineering field. *Computers & Chemical Engineering*, 114, 111–121. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2017.10.008
- Linderoth, L., Wright, S., 2003. Decomposition Algorithms for Stochastic Programming on a Computational Grid. *Computational Optimization and Applications*, 24, 207–250. DOI: 10.1023/A:1021858008222
- Marchetti, A.G., François, G., Faulwasser, T., Bonvin, D., 2016. Modifier Adaptation for Real-Time Optimization-Methods and Applications. *Processes*, 4, 55. DOI: 10.3390/pr4040055
- Masoooleh, L. S., Arbogast, J. E., Seider, W. D., Oktem, U., Soroush, M., 2022. Distributed state estimation in large-scale processes decomposed into observable subsystems using community detection. *Computers & Chemical Engineering*, 156, 107544. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2021.107544
- Mesbah, A., 2018. Stochastic model predictive control with active uncertainty learning: A survey on dual control. *Annual Reviews in Control*, 45, 107–117. DOI: 10.1016/j.arcontrol.2017.11.001
- Microsoft Corporation, 2020. Azure Digital Twins. URL: <https://azure.microsoft.com/es-es/services/digital-twins/#overview> (accedido 2.7.22).
- Oh, T.H., Souza, L.F.S., Lee, J.M., 2021. Applying Digital Application Platform to Optimize Steam Methane Reforming Process, in: 2021 21st Inter. Conf. on Control, Automation and Systems (ICCAS). pp. 388–393. <https://doi.org/10.23919/ICCAS52745.2021.9650053>
- Oliveira-Silva, E., de Prada, C., Navia, D., 2021. Dynamic optimization integrating modifier adaptation using transient measurements. *Computers & Chemical Engineering*, 149, 107282. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2021.107282
- Palacín, C. G., Vilas, C., Alonso, A. A., Pitarch, J. L., de Prada, C., 2020. Closed-Loop Scheduling in a Canned Food Factory, 53-2, 10791-10796. In *IFAC-PapersOnLine*. 21st IFAC World Congress.
- Pfeiffer, B.-M., Oppelt, M., Leingang, C., 2019. Evolution of a Digital Twin for a Steam Cracker, in: 2019 24th IEEE International Conference on Emerging Technologies and Factory Automation (ETFA). pp. 467–474. DOI: 10.1109/ETFA.2019.8869449
- Pitarch, J. L., Sala, A., de Prada, C., 2019. A systematic grey-box modeling methodology via data reconciliation and SOS constrained regression. *Processes*, 7(3), 170. DOI: 10.3390/pr7030170
- Qin, S., Jin, T., Van Lehn, R. C., Zavala, V. M., 2021. Predicting Critical Micelle Concentrations for Surfactants Using Graph Convolutional Neural Networks. *The Journal of Physical Chemistry B*, 125(37), 10610-10620. DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c05264
- Reinbold, P. A., Kageorge, L. M., Schatz, M. F., Grigoriev, R. O., 2021. Robust learning from noisy, incomplete, high-dimensional experimental data via physically constrained symbolic regression. *Nature communications*, 12(1), 1–8. DOI: 10.1038/s41467-021-23479-0
- Sansana, J., Joswiak, M. N., Castillo, I., Wang, Z., Rendall, R., Chiang, L. H., Reis, M. S., 2021. Recent trends on hybrid modeling for Industry 4.0. *Computers & Chemical Engineering*, 151, 107365. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2021.107365
- Sarabia, D., de Prada, C., Gomez, E., Gutierrez, G., Cristea, S., Sola, J.M., Gonzalez, R., 2012. Data reconciliation and optimal management of hydrogen networks in a petrol refinery. *Control Engineering Practice*, 20(4), 343–354. DOI: 10.1016/j.conengprac.2011.06.009
- Shafto, M., Conory, M., Dolye, R., Glaessgen, E., Kemp, C., LeMoigne, J., Wang, L., 2010. DRAFT Modeling, Simulation, Information Technology & Processing Technology Area 11.
- Smallwood, R. D., Sondik, E. J., 1973. The optimal control of partially observable Markov processes over a finite horizon. *Operations research*, 21(5), 1071–1088. DOI: 10.1287/opre.21.5.1071
- Yokogawa, 2022. Digital Twin. URL: https://www.yokogawa.com/solutions/solutions/digital-transformation/digital-twin/#Resources__White-Papers (accedido 2.7.22).