

RESÚMENES DE TESIS DOCTORALES

Sección de Físicas

Modelado computacional de la decisión cooperativa: perspectivas simbólica y conexionista

Ángeles Manjarrés Riesco. Autora
José Mira Mira y Ana Delgado García. Directores
Departamento de Inteligencia Artificial
Fecha de lectura: 23 de marzo de 2001

Inspiración: El fenómeno biológico de la cooperatividad

Sostienen Maturana y Varela que es la aparición del lenguaje en el hombre en un contexto social lo que genera el fenómeno inédito –hasta donde sabemos– de la mente y la autoconsciencia: “La unicidad de lo humano, su patrimonio exclusivo, está en su darse en un acoplamiento estructural social humano, que incluye entre otros el fenómeno de las identidades personales; y cuya dinámica recursiva produce la reflexividad que da lugar al acto de mirar con una perspectiva más abarcadora, al acto de salirse de lo que hasta ese momento era invisible e inamovible, permitiendo ver que como humanos sólo tenemos el mundo que creamos con otros”.

A pesar de la exclusividad de este fenómeno, los autores reconocen en la dinámica social humana una forma más de “acoplamiento estructural”. El fenómeno biológico del acoplamiento estructural al medio como condición de existencia, abarca todas las dimensiones de las interacciones celulares. Organismos, sociedades y ecosistemas pertenecen a una misma clase de metasistemas, formados por la agregación de unidades, celulares o metacelulares, de cualquier orden, cuyas características esenciales son la capacidad autoorganizativa de producirse a sí mismos y la plasticidad estructural. Las interacciones entre los compo-

nentes de dichos metasistemas adquirieron a lo largo de su ontogenia un carácter recurrente, estableciéndose un acoplamiento estructural que permitió el mantenimiento de las individualidades dentro de una nueva cohesión espacial. La coherencia y armonía en las relaciones e interacciones, que encuentran en el término “cooperatividad” una descripción útil, se deben, en el desarrollo como individuos de estos metasistemas, a factores genéticos y ontogenéticos que acotan la plasticidad estructural de sus componentes. Aunque el énfasis de Darwin en la supervivencia del más apto pueda dirigir la atención hacia las interacciones negativas, lo cierto es que, parafraseando de nuevo a Maturana y Varela, “la existencia de lo vivo en la deriva natural, tanto onto como filogenética, no se da en la competencia sino en la conservación de la adaptación”.

Los diferentes niveles de acoplamiento estructural están mutuamente relacionados, de modo que cada uno ejerce su influencia en los inmediatamente adyacentes. No obstante, presentan también diferentes aspectos, frecuentemente únicos. En cada nivel organizacional emergen nuevas propiedades que no estaban presentes o no eran evidentes en el nivel precedente.

Los paralelismos entre sociedades cooperativas humanas y animales deben también establecerse cuidadosamente. Similaridades superficiales

pueden encubrir diferencias sutiles pero significativas. El acoplamiento estructural en dominios lingüísticos origen de la autoconsciencia es –creemos– patrimonio exclusivo de las sociedades humanas. Ese “operar lingüístico” está profundamente ligado a una plasticidad estructural y una capacidad de aprendizaje social continuo únicos.

Minsky encontró útil la metáfora de la “sociedad de la mente” para la explicación de la fenomenología cerebral. Si se revisan los principios que definen las organizaciones sociales, el fundamento de dicha metáfora resulta claro no sólo desde una perspectiva explicativa de los procesos cognitivos, sino también desde una perspectiva descriptiva del nivel puramente físico, fisiológico.

En las sinapsis neuronales tienen lugar interacciones específicas entre grupos celulares distantes en evidente analogía con grupos sociales que participan en procesos de decisión cooperativa –con la intervención de factores como la jerarquización (variabilidad de las eficiencias sinápticas) o identificación (influencia localizada y no indiscriminada)– y se transmiten señales de origen tanto filo como ontogenético, con referentes en eventos internos (de significado fisiológico) o externos (del entorno). Tales señales pueden verse como “disparadores” de conductas (alteran los estados de actividad neuronales).

La actividad de las neuronas individuales es menos relevante que la “organización social global”. El comportamiento de la red neuronal está sobre todo condicionado por los patrones de conectividad, cuyas regularidades definen una organización plástica (los cambios estructurales ocurren en las sinapsis), adaptable en respuesta al entorno cambiante o a la propia dinámica interna (acoplamiento filogenético que se expresa en el aprendizaje). La división de roles con redundancia y su asignación dinámica (multi-

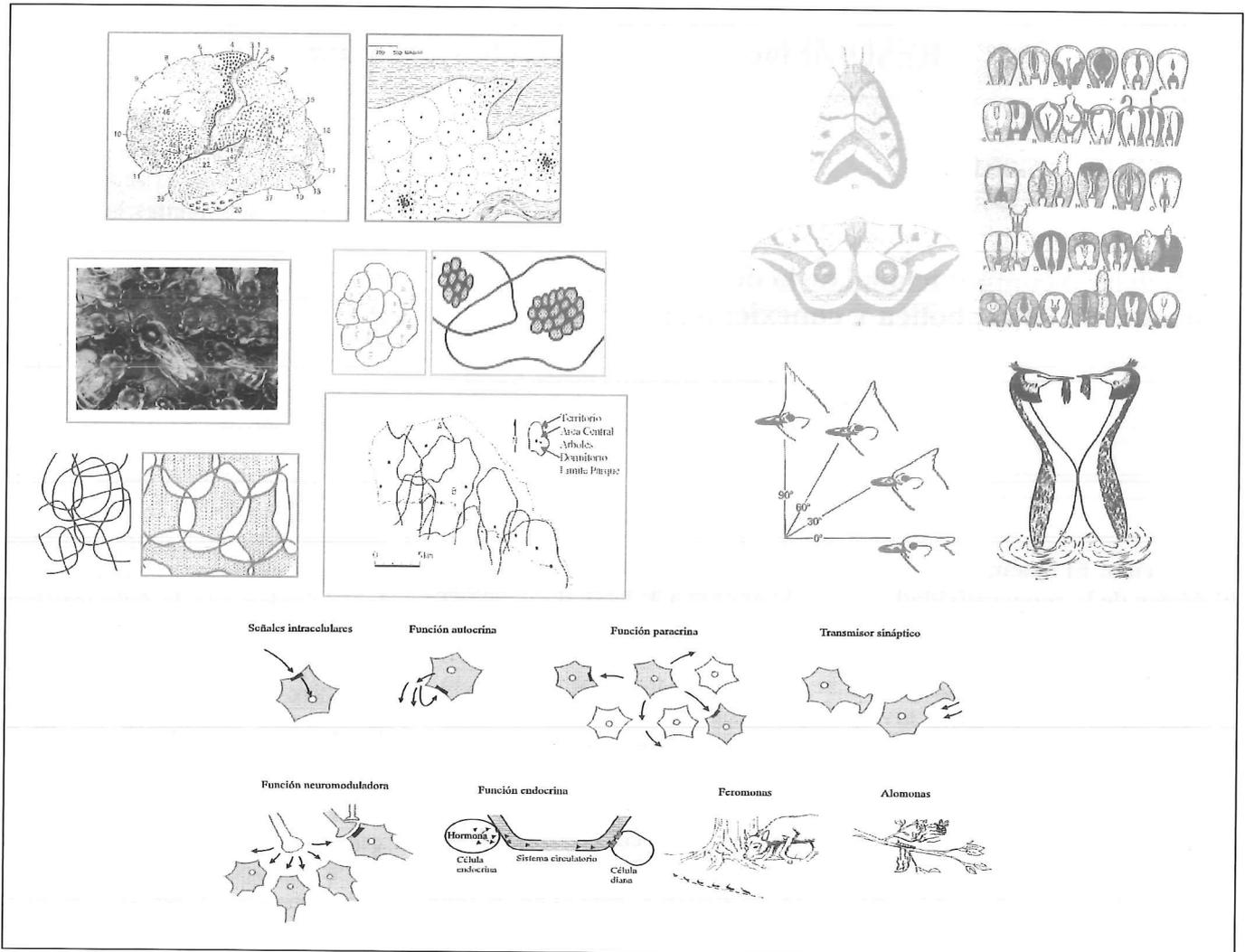


Figura 1. Superior izquierda: Patrones organizativos en sociedades biológicas (regiones estructurales/funcionales de la corteza cerebral; abeja reina rodeada de sus trabajadoras; mapas territoriales -cobos, ruiseñores, gaviotas, ciervos, perros salvajes, babuinos-) Superior derecha: Comunicación en sociedades biológicas. Inferior: Señales químicas intra y entre organismos.

plicidad funcional) explican la supervivencia de la organización (función residual) y capacidad de rehabilitación (reconfiguración de la red) ante la pérdida de miembros de la sociedad (efectos de una lesión).

No es pertinente, no obstante, ir demasiado lejos con la analogía social. En las sociedades animales o humanas intervienen factores de supervivencia psicológicos, reproductivos, alimenticios, etc., sin correspondencia en las sociedades neuronales. Los aspectos comunes se refieren a principios organizacionales básicos, a modos de organización eficaz para la consecución de objetivos comunes, comprendidos en el propósito último de la supervivencia.

La metáfora de la “sociedad de la mente” atribuye un comportamiento inteligente a la neurona, un propósito e intencionalidad en el comportamiento cooperativo. En el dominio de la red neuronal, no obstante, estructura y función son coincidentes: sólo existe el modo de operar seleccionado por la evolución natural. Del mismo modo, en la descripción de la conducta de los insectos sociales, utilizamos términos descriptivos que sugieren que sus vidas están organizadas de forma inteligente. La magnífica adaptatividad de sus colonias, y el control que ésta les confiere sobre su medio, están basados, sin embargo, en una serie relativamente simple de respuestas químicas de flexibilidad muy acotada, confinadas dentro de unos lími-

tes hereditarios que son característicos de la especie.

La relación entre fisiología y comportamiento es siempre estrecha, como ilustra el papel de las hormonas en el comportamiento sexual, maternal o de agresión. Las descripciones de las sociedades neuronales y de los animales sociales no son menos antropomórficas que la que cotidianamente hacemos de otras conductas animales. Los animales se comportan socialmente porque es adaptivo para ellos, del mismo modo en que lo es que la sangre libere oxígeno en los tejidos. El comportamiento social es una parte vital de la adaptación, y obviamente funciona en asociación con adaptaciones fisiológicas y anatómicas. El valor de la cooperación

social es claro: permite la existencia en circunstancias en que individuos solitarios perecerían o tendrían menos éxito en su reproducción, facilita la obtención de alimento, proporciona protección mediante señales de advertencia que comunican peligro...

También las propias relaciones sociales humanas pueden explicarse mediante principios utilitarios. Nuestro comportamiento, individual o social, no es azaroso, inexplicable o impredecible, y es posible encontrar motivaciones de distinta índole o intensidad, de origen psicológico o fisiológico, que lo justifiquen. Pero estas reflexiones sobre el significado de la cooperatividad como fenómeno biológico sólo pretenden sentar las bases de un trabajo de investigación inscrito en el área de conocimiento de la Inteligencia Artificial (I.A.). No son las ciencias de la computación las disciplinas indicadas para sostener un debate sobre las concepciones mecanicistas que hacen partícipe al hombre del orden causal del universo. Ni ha sido nuestro objetivo perseguir a la mente reflexiva hasta el transfinito a través del entramado de estructuras cooperativas, recurrentes sin fin, de los sistemas vivos...

Contexto: Modelos computacionales de la cooperatividad en I.A.

El comportamiento social de los seres vivos es estudiado por científicos de variadas especialidades, tales como ecología, psicología, fisiología, zoología o antropología. Aunque sus intereses difieren, cada una de estas disciplinas contribuye con su propia filosofía, métodos y pericia. El campo de estudio de la I.A. cuyo fundamento es la "explicación y emulación del comportamiento inteligente (percepción - razonamiento - acción) en términos de procesos computacionales", ha colaborado también, obviamente, con las mencionadas disciplinas, en el análisis de los procesos sociales cooperativos.

En el campo de la computación simbólica, los modelos de la cooperatividad se enmarcan en el paradigma de "Agentes Inteligentes Cooperativos", aplicado esencialmente en el área de la Inteligencia Artificial Distribuida (I.A.D.). Entre tales modelos cabe destacar los ya ampliamente difundidos Modelos de Pizarra. En los sistemas conexionistas, la cooperatividad es un componente aún más esencial que en los modelos simbólicos mencionados, pues fundamenta la emergencia de una "inteligencia colectiva" a partir de grupos de agentes software/hardware muy simples. La fuerte inspiración biológica de este campo se encuentra principalmente en las redes neuronales y en las colonias de insectos, "sociedades" donde emana un comportamiento colectivo complejo y sofisticado a partir de la interacción entre individuos que exhiben un comportamiento relativamente sencillo.

División eficiente de tareas, estable frente a perturbaciones del medio; patrones de auto-organización para el aprovisionamiento adaptables a la distribución espacial de los recursos; construcción cooperativa de viviendas; difusión de alarmas... son manifestaciones de la fenomenología social en sistemas biológicos de diferentes órdenes. Flexibilidad y fiabilidad son las características más distintivas de las sociedades biológicas, capaces de adaptarse a entornos cambiantes y de funcionar incluso cuando algunos de sus individuos realizan deficientemente sus tareas.

Muchos de los problemas que resuelven las sociedades biológicas tienen una contrapartida en ingeniería y ciencias de la computación, y de ahí que hayan servido como metáfora para diseñar algoritmos de optimización distribuidos, sistemas multiagente y grupos de robots; y redes de telecomunicaciones y radio. Tan clara es, por tanto, la importancia de la investigación del fenómeno biológico cooperativo como la utilidad práctica, desde el punto de vista de la ingeniería del software, de los sistemas computa-

cionales inspirados en estos modelos, caracterizados por su carácter descentralizado, la interacción directa o indirecta entre agentes software, y una notable capacidad de adaptación y tolerancia a fallos.

Resultados: Un paradigma computacional común a los sistemas de agentes y las redes neuronales artificiales

La formulación de modelos cooperativos es pues de indudable interés en el seno de la I.A., desde su doble propósito de análisis y síntesis del comportamiento inteligente. Es este convencimiento lo que ha motivado los estudios que integran esta tesis, donde se analiza la cooperatividad como método de resolución de tareas. Este análisis se inscribe en un contexto actual de la I.A. aplicada en que el énfasis de la investigación se ha dirigido hacia la construcción de "modelos en el nivel de conocimiento" (en el sentido de Newell), supuestamente usados por los expertos humanos en la realización de tareas inteligentes de naturaleza diversa.

Las estructuras cooperativas que constituyen los organismos vivos son recurrentes: la velocidad de formación de una estructura celular depende mucho de si ésta surge de un desorden total o sólo se completa o forma a partir de un "patrón", de modo que las células vivas utilizan muchas veces el método de "copiar" estructuras en lugar de construirlas a partir de sus elementos básicos. También los organismos superiores utilizan este principio, siendo ésta la razón de la uniformidad relativamente grande que se aprecia en los seres vivos actuales. La vida se caracteriza por la capacidad de multiplicarse, de extenderse intensivamente. Esta capacidad de réplica, de acumular informaciones y transmitir las —a través de la propia estructura— en los procesos de multiplicación, determina su potencialidad de crecimiento, adaptación y auto-recuperación. Este principio básico de formación

de los sistemas celulares es aplicable también a los sistemas software cooperativos. Un sistema bien estructurado exhibe una armonía y equilibrio de diseño que se deriva del hecho de estar definido como una combinación de "patrones", grupos de elementos que trabajan juntos en formas comunes para proporcionar un comportamiento cooperativo. Hacer explícitos los patrones que constituyen un sistema lo hace más flexible al cambio, más fácil de evolucionar y mantener, del mismo modo que los patrones estructurales celulares recurrentes favorecen el crecimiento y multiplicación en los organismos vivos.

El objetivo último de los estudios aquí reportados ha sido pues explorar los principios organizacionales que subyacen a todo fenómeno biológico cooperativo y aportar a las bibliotecas de modelos de la I.A. un catálogo de métodos o "patrones"

de cooperatividad. Adicionalmente, la consideración de métodos cooperativos impele la adopción de una nueva perspectiva metodológica, de modo que, necesariamente, de este estudio se han derivado asimismo aportaciones en el campo de las metodologías de desarrollo de sistemas I.A.

En coherencia con los principios biológicos que han inspirado estas investigaciones, los modelos formulados responden a un paradigma único del método cooperativo que se manifiesta en la resolución de tareas en tres niveles fenomenológicos distintos. El nivel en que el método cooperativo está más explícito se refiere a la colaboración entre expertos de un área de conocimiento. Con los dos niveles restantes se alude a la interacción entre los procesos implicados en el razonamiento individual, respectivamente en el plano psicológico (metáfora de

la sociedad de la mente, en el sentido de Minsky) y en el plano de las redes neuronales físicas (metáfora de la sociedad neuronal, en la línea de los trabajos de Mira y Delgado). Diferentes órdenes de cooperatividad aparecen imbricados, reproduciendo las estructuras cooperativas recursivas que exhiben los metasisistemas biológicos.

En términos de I.A., este modelo único de la cooperatividad supone la integración del paradigma de computación simbólica de la Teoría de Agentes y el paradigma conexionista. Un método cooperativo se identifica con una estructura organizativa. La correspondencia estructura-función y la manifestación del aprendizaje como reconfiguración estructural, características distintivas de la computación neuronal, se revelan igualmente en los modelos computacionales de la cooperatividad del nivel simbólico. El análisis de un

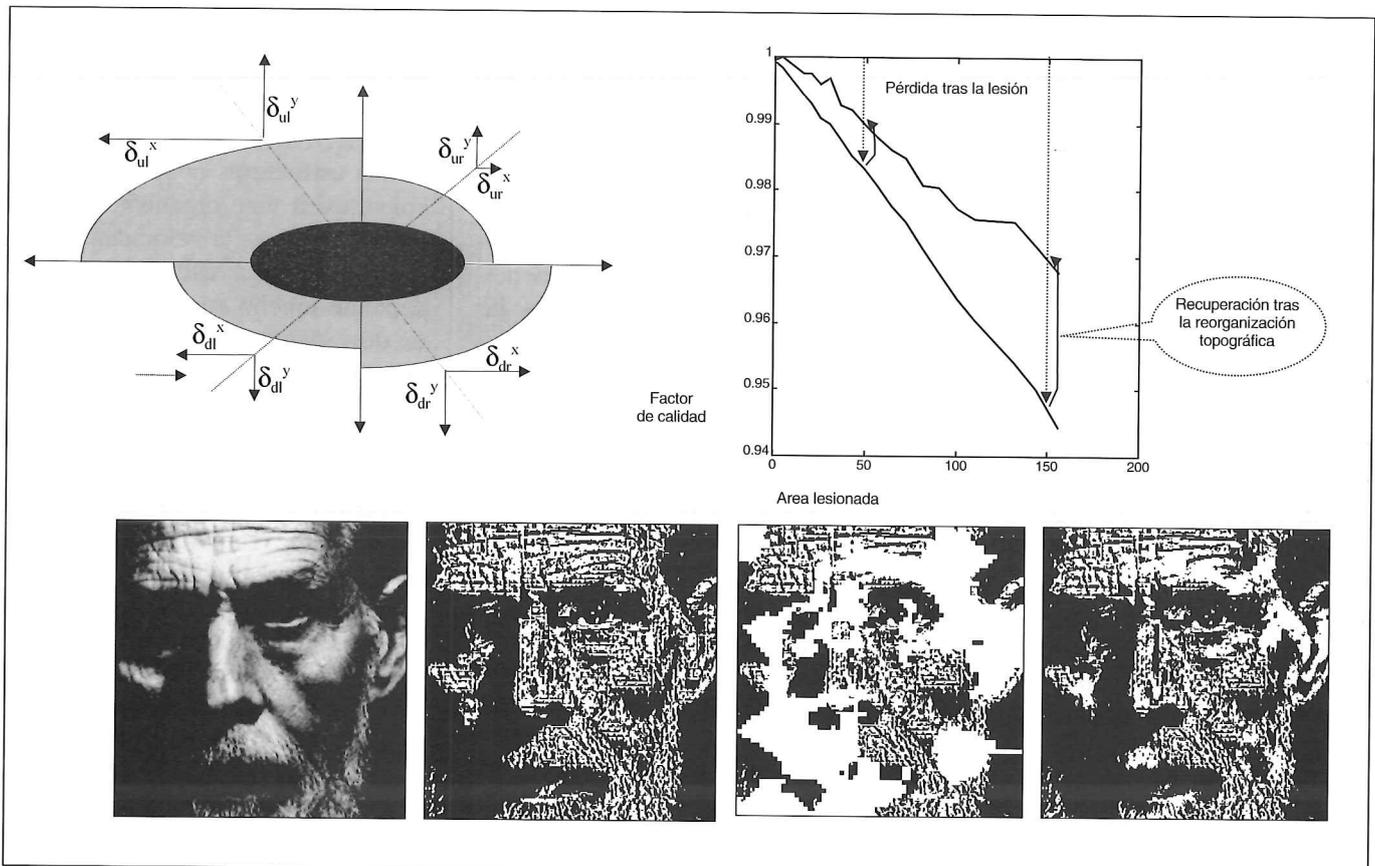


Figura 2. Superior izquierda: Modificación de parámetros que definen campos receptivos neuronales de forma elíptica. Superior derecha: Variación de un factor de calidad de la imagen en función del área lesionada en el instante inicial y una vez finalizado el proceso de rehabilitación. Inferior: Imagen del rostro de Warren McCulloch, umbralización local sin lesión, imagen residual después de varias lesiones de tipo escotoma recuperación parcial de factores tras la reestructuración de los campos receptivos neuronales.

método cooperativo es básicamente un análisis de los elementos definitivos de un acoplamiento estructural social, determinantes del comportamiento o funcionalidad global de una colectividad: relaciones, patrones autoorganizativos e interacciones de comunicación. Es esta idiosincrasia de los métodos cooperativos lo que ha impulsado la consideración del modelo de computación Orientada a Objetos (O.O.) como paradigma de análisis, complementario al paradigma funcional adoptado, en lo esencial, por las metodologías de desarrollo propias de la I.A.

Partiendo de la visión del fenómeno biológico de la cooperatividad como origen del propio fenómeno cognitivo, los modelos analizados incluyen ciertas capacidades reflexivas. En un sistema de agentes cooperativos, cada agente individual integra en su modelo del entorno modelos del conjunto de agentes como variables predictivas esenciales. De estos modelos no pueden excluirse los automodelos, imprescindibles para la representación del comportamiento de interacción de un agente con su entorno social. Nuestro máximo interés en las teorías reflexivas procede asimismo de la búsqueda de un paradigma uniforme de modelado de tareas en I.A. que permita plasmar la idiosincrasia de las tareas de aprendizaje. Con esta intención proponemos unas pautas

de análisis basadas en los conceptos de la reflexividad, y orientadas por tanto hacia arquitecturas de metanivel, apoyando la perspectiva del aprendizaje como "inferencia reflexiva que utiliza automodelos". Con la consideración de un metanivel de aprendizaje buscamos modelar agentes con capacidades introspectivas, capaces de razonar sobre sus propios comportamientos y estructura (en lo que respecta a la dinámica tanto interna como relacional -social-), analizarlos y transformarse a sí mismos con propósitos adaptivos.

Los modelos definidos se ilustran finalmente con ejemplos de aplicación en diferentes áreas de la ingeniería del conocimiento. Particular atención se presta a las aplicaciones en el campo de la Visión Artificial, donde el método cooperativo define un modelo de "red neuronal inferencial social" profundamente inspirado en la neurobiología. La memoria presenta dos implementaciones de redes neuronales, desarrolladas con el objetivo de ilustrar la aplicabilidad de los métodos neuronales de decisión social formulados: "Umbralización adaptiva espacialmente variable tolerante a fallos" y "Detección de bordes con aprendizaje automático de escala". Con dichas implementaciones se ha pretendido sintetizar dos fenómenos neurobiológicos que revelan la organización social.

momento presente, el modelo educativo de educación a distancia tradicional se ha basado fundamentalmente en las tutorías telefónicas o en el correo ordinario, la enseñanza de la Automática, o de alguna otra disciplina con un fuerte contenido experimental, requiere de un elemento que permita al estudiante poner en práctica todos los conocimientos que vaya adquiriendo a lo largo del estudio de la materia. No descubrimos nada al decir que este papel en las enseñanzas tradicionales lo desempeña el laboratorio de prácticas, el cual, inexorablemente, requiere de la presencia física del estudiante para poder manipular los sistemas de control y las plantas existentes en un entorno controlado bajo la supervisión del profesor de prácticas. Por consiguiente, trasladando este entorno práctico a la enseñanza a distancia, el elemento necesario para poder abordar un estudio de la Automática de forma completa es la existencia de un conjunto de laboratorios virtuales y remotos de Automática con la posibilidad de que el alumno gobierne de forma remota plantas simuladas o reales situadas en las dependencias físicas del laboratorio.

De acuerdo con las apreciaciones anteriores, el trabajo desarrollado en la Tesis Doctoral se pueden concretar en la creación de tres de sistemas de apoyo a la enseñanza de la Automática:

- Un *laboratorio virtual mono-usuario* consistente en un entorno de simulación interactivo y dinámico basado en el paradigma Modelo-Vista-Controlador desde el que se puede experimentar de forma dinámica e interactiva sobre modelos parametrizables, es decir, ajustables por el tutor para adecuarlos a la explicación y comprensión de algunos de los conceptos de la Ingeniería de Control. Las Figuras 1-4 constituyen algunas de las interfaces de experimentación desarrolladas en Java para la interacción con los modelos de las plantas.

Un nuevo enfoque metodológico para la enseñanza a distancia de asignaturas experimentales: análisis, diseño y desarrollo de un laboratorio virtual para el estudio de la Automática a través de Internet

José Sánchez Moreno. Autor
 Sebastián Dormido Bencomo. Director
 Departamento de Informática y Automática
 Fecha de lectura: 23 de noviembre de 2001

En la sociedad actual en que nos encontramos inmersos, la educación a distancia se presenta como la solución idónea para un conjunto de

colectivos que demandan sistemas de enseñanza mucho más flexibles y accesibles (sin limitaciones espaciales ni temporales). Si bien hasta el

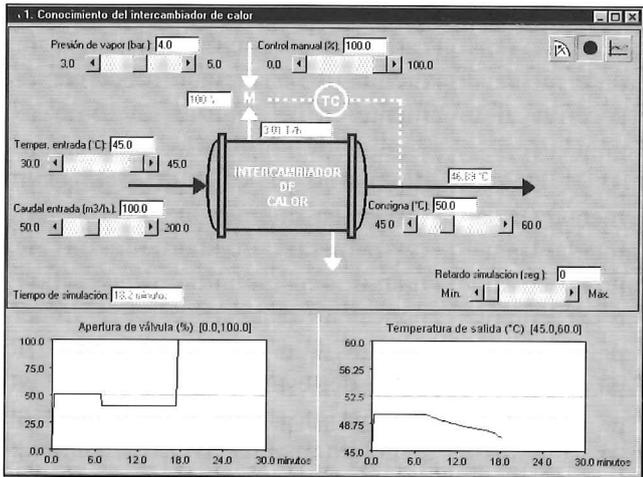


Figura 1. Interfaz para el control clásico de un intercambiador de calor.

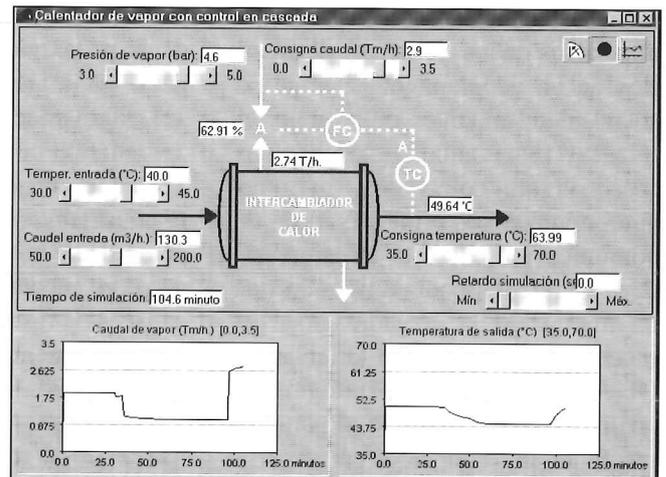


Figura 2. Interfaz para control en cascada de un intercambiador de calor.

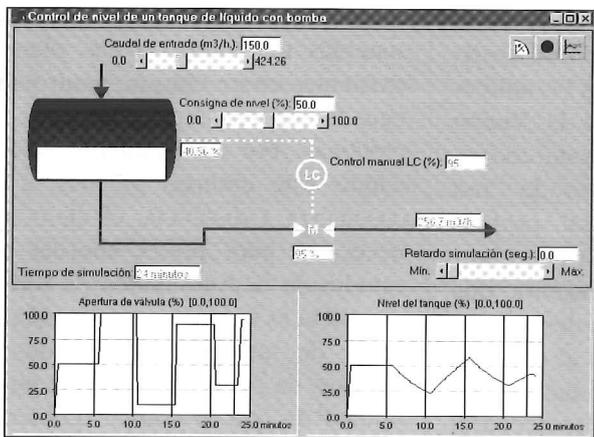


Figura 3. Interfaz para el control del nivel de líquido de un tanque.

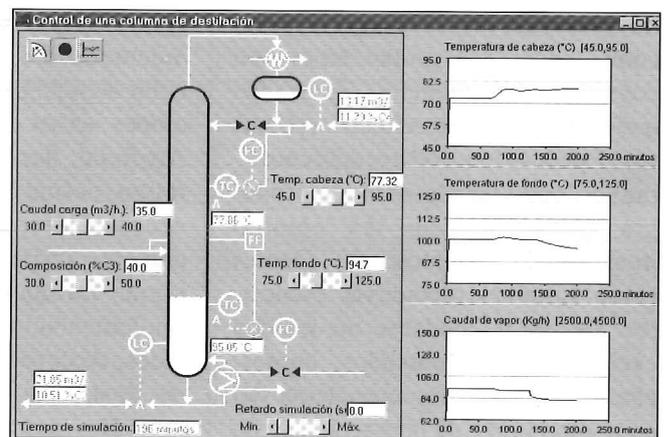


Figura 4. Interfaz para el control avanzado de una columna de destilación.

- Un laboratorio virtual multiusuario. Evolución del entorno anterior convirtiéndolo en una aplicación WBS (Web-based simulation) de forma que sea accesible a través de Internet y de forma simultánea por varios usuarios.
- Un telelaboratorio para la teleoperación a través del WWW de un sistema físico, en este caso, un péndulo invertido. Desde el punto de vista software, el sistema se ha desarrollado partiendo de los mismos fundamentos en lo que se basan los dos entornos de simulación previos. Con el fin de posibilitar su acceso las 24 horas del día y proporcionar una realimentación al estudiante no sólo cuantitativa sino cualitativa, el entorno dispone de un sistema de iluminación y visualización remota con con-

trol remoto de una cámara motorizada.

Entre otras aportaciones contenidas en la Memoria se puede destacar el estudio de las posibles alternativas para la creación de laboratorios virtuales y remotos, el

análisis del modelo de Simulación Basada en el Web estableciendo un conjunto de criterios para su clasificación y diseño, y la descripción clara y exhaustiva de los elementos que intervienen en todo entorno de teleoperación a través del Web.

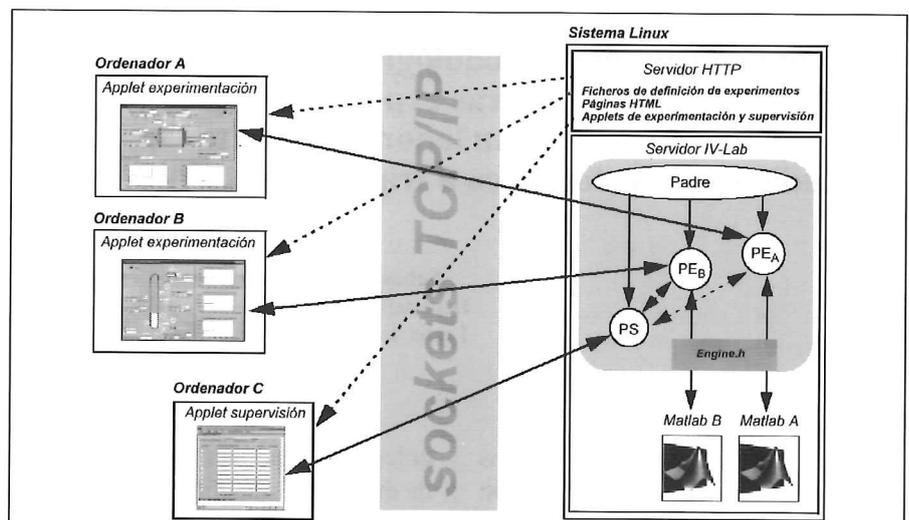


Figura 5. Esquema de un entorno de simulación basado en el Web.

Diseño de controladores PID para sistemas MIMO con control descentralizado

Francisco Javier Vázquez Serrano. Autor
 Fernando Morilla García. Director
 Departamento de Informática y Automática
 Fecha de lectura: 30 de noviembre de 2001

El resultado principal de la tesis es un nuevo método de sintonía de controladores PID para sistemas multivariables descentralizados, figura 1.

El método se basa en un algoritmo iterativo, que busca la resolución numérica de un conjunto de especificaciones analíticas. Estas especificaciones se realizan en el dominio de la frecuencia para cada uno de los lazos, pudiendo ser de sólo margen de fase, sólo margen de ganancia o ambos simultáneamente. Su planteamiento permite analizar la proximidad entre el diseño conseguido y las especificaciones iniciales, en forma de un índice de calidad. La efectividad del algoritmo se ha mostrado con una amplia batería de sistemas extraídos de la literatu-

ra, así como con varias plantas experimentales, entre las que destaca una pasteurizadora a escala de la que previamente se ha obtenido el modelo mediante dos procedimientos: por una lado mediante la identificación paramétrica y por otro a partir de los balances en estado estacionario. Esta planta y su esquema se muestran en las figuras 2 y 3.

La citada metodología se puede combinar con otras técnicas, como son los desacoplos, conformando una estrategia de control centralizado. En estos casos, el diseño del controlador se realiza en dos fases: diseño de la red de desacoplo y sintonía de los PID para el conjunto desacoplo + planta. Este tipo de diseño se ha probado, con éxito, en

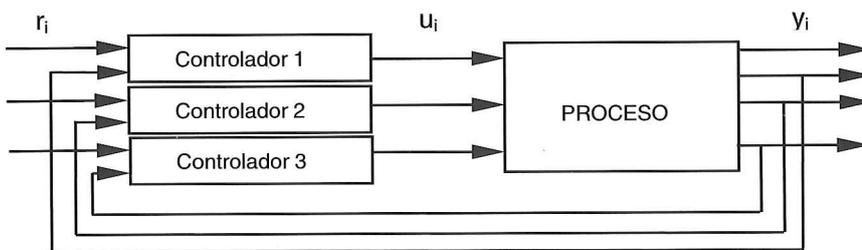


Figura 1. Esquema de un sistema multivariable con control descentralizado.

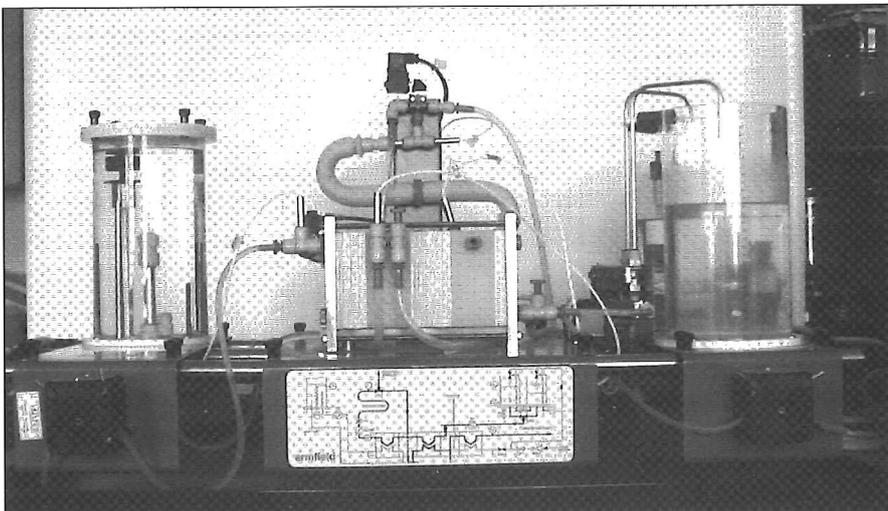


Figura 2. Fotografía de la planta pasteurizadora PCT-23.

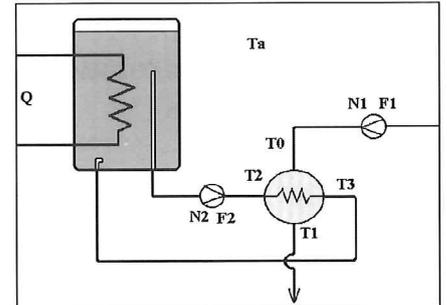


Figura 3. Esquema del sistema multivariable a controlar en la PCT-23.

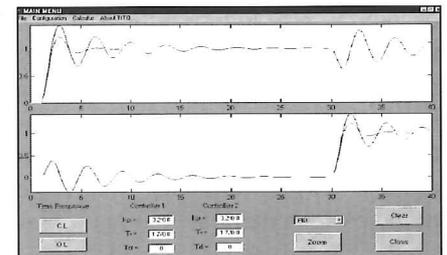


Figura 4. Captura de la ventana principal del entorno TITO.

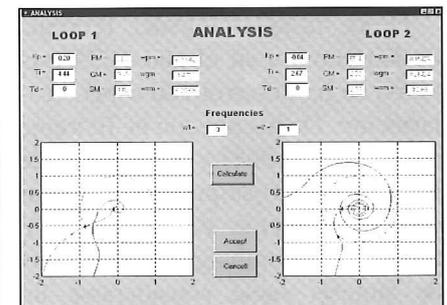


Figura 5. Captura de la ventana de análisis mediante los diagramas de Nyquist.

diversos modelos con interacción apreciable.

El algoritmo se ha implementado junto con una interfaz gráfica de usuario amigable, desarrollada en MATLAB, denominada TITO. Dicho entorno incluye todas las posibilidades de diseño que permite el método, mostrando los resultados de cada iteración en forma gráfica. Además contiene herramientas para la medida de la interacción, para la simulación de las respuestas temporales (en lazo abierto y lazo cerrado) figura 4, y para el análisis frecuencial de los diseños realizados, figura 5.

Los resultados de la tesis han sido presentados en diversas publicaciones, tanto nacionales como internacionales.

Diseño de controladores robustos en el espacio de parámetros

Raquel Dormido Canto. Autora
Roberto Hernández Berlinches. Director
 Departamento de Informática y Automática
 Fecha de lectura: 3 de diciembre de 2001

Hoy en día el control robusto es una de las áreas que más atención despierta entre los investigadores en teoría de control. Se entiende generalmente como control robusto a la teoría que trata los sistemas de control teniendo en cuenta las perturbaciones explícitamente mediante modelos matemáticos que las representan. Dentro de las diferentes aproximaciones al problema de control robusto, la conocida como resultados de puntos extremos ha suscitado un especial interés en la última década.

Desde la aparición del Teorema de Kharitonov en el año 1978 esta teoría se ha desarrollado espectacularmente. De hecho, con el Teorema de la arista (1988) y el Teorema de Rantzer (1992) se puede considerar que el problema de análisis está resuelto. Sin embargo, el problema de síntesis suele considerarse un problema difícil.

En general, los distintos resultados de síntesis existentes se caracterizan por la necesidad de diseñar controladores que garanticen la estabilidad de un número finito de polinomios característicos asociados a un conjunto de plantas distinguidas.

Dichos resultados adquieren mayor o menor aplicabilidad en la medida en que sea posible encontrar el conjunto de valores de los parámetros del controlador que garanticen la estabilidad de estos polinomios característicos. Este problema suele resolverse mediante las tablas de Routh o mediante el método de Ackerman, pero ambos métodos presentan muy serias dificultades cuando el número de parámetros es mayor que dos.

Atendiendo a estas consideraciones en esta tesis se han desarrollado resultados que permiten la estabilización de un polinomio de cualquier orden con cualquier número de parámetros. Esto, de hecho, sería el resultado análogo al Teorema de Kharitonov aplicado a la síntesis. El conjunto de resultados establecidos permiten desarrollar un algoritmo tal que determine un conjunto de valores de los parámetros que estabilicen el polinomio, o que indique, en su caso, que el polinomio no es estabilizable. La aplicación de este algoritmo al problema de diseño de controladores robustos es tan inmediata como lo es el Teorema de Kharitonov para el problema de análisis.

Programación dinámica paralela: aplicación a problemas de control

Sebastián Dormido Canto. Autor
Ángel Pérez de Madrid Pablo. Director
 Departamento de Informática y Automática
 Fecha de lectura: 3 de diciembre de 2001

La Programación Dinámica, basada en el Principio de Óptimo de Bellman (1957), es una potente herra-

menta que permite la resolución de una amplia familia de problemas de optimización dentro de la teoría del

control. Gracias a sus especiales características puede hacer frente a sistemas, funciones objetivo y ligaduras altamente no lineales de una manera muy natural e intuitiva, sin necesidad de considerar especialmente las restricciones ni formulaciones matemáticas específicas para su tratamiento.

La Programación Dinámica constituye una disciplina muy importante de la investigación operativa y de las matemáticas aplicadas, y su método estándar se aplica en áreas tan dispares como ingeniería, inteligencia artificial, economía, gestión, etc. En la disciplina de la automática son muchos los campos que conducen a problemas de Programación Dinámica: control óptimo y afines, control robusto, control no lineal, etc.

El principal inconveniente, compartido con todas las técnicas de optimización de tipo combinatorio, es su alto coste computacional. Esto hace que la solución exacta no pueda ser obtenida en ocasiones en un tiempo razonable.

Por este motivo, en las últimas décadas y coincidiendo con el desarrollo de los sistemas de computación (*software* y *hardware*), se han venido desarrollando diversas técnicas que permiten una considerable reducción de la complejidad computacional, aunque a veces los niveles alcanzados siguen sin ser suficientemente válidos. Por otra parte, los algoritmos de Programación Dinámica pueden ser reformulados para su ejecución en un computador paralelo, de manera que la solución se obtenga en un tiempo mucho menor.

Si bien hace pocos años los computadores paralelos eran enormemente costosos, hoy en día es posible implementar computadores paralelos virtuales, a un coste aceptable y fácilmente escalables, a partir de redes de estaciones de trabajo ordinarias, lo que genéricamente se denomina como *cluster*.

Frente a los supercomputadores paralelos comerciales, los *clusters* hacen uso del sistema operativo Linux y de herramientas de programación que siguen la filosofía del *software* libre. De este modo, todo

el *software* y la documentación necesarios para montar, configurar y mantener el *cluster* se encuentran disponibles de manera libre y gratuita en Internet. Así es posible obtener sistemas de muy alto rendimiento a bajo costo.

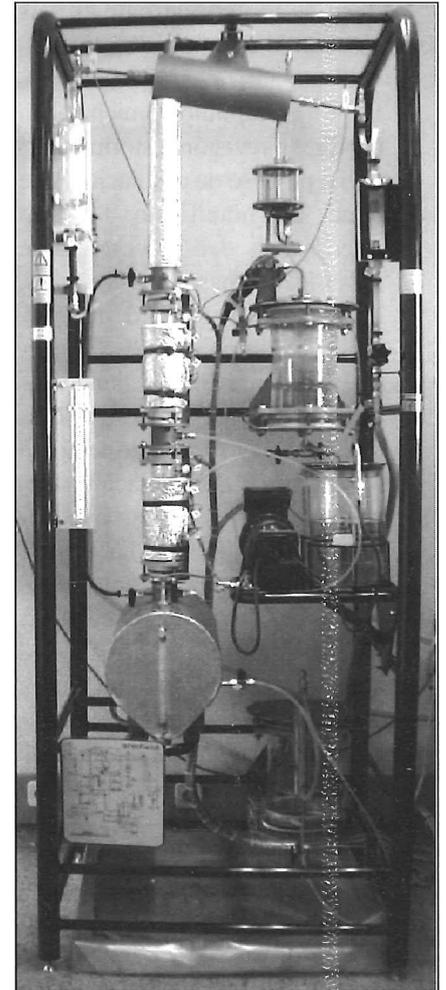
El objetivo de esta Tesis es *desarrollar algoritmos paralelos de Programación Dinámica generales para clusters, utilizando el paso de mensajes como paradigma de programación, que sean de utilidad en el campo de control de procesos.*

Para ello se tomarán como puntos de partida los algoritmos secuenciales de Programación Dinámica y las mejores técnicas de reducción de complejidad (aproximaciones sucesivas, reducción sistemática del grid computacional, etc).

A la hora de implementar estos algoritmos hay que tener en cuenta que los requerimientos de los algo-

ritmos paralelos son muy diferentes de los que se necesitan en sus versiones secuenciales:

- Dividir el problema inicial en subproblemas ejecutables en paralelo.
- Repartir los datos de entrada en las memorias locales para mantener cada procesador ocupado el máximo tiempo y con ello reducir la carga de la red de comunicaciones.
- Organizar las comunicaciones entre los procesadores locales para reducir la carga de la red de comunicaciones (disminuir la granularidad de las comunicaciones).
- Garantizar la eficiencia en el uso de los procesadores (balanceo de la carga computacional).
- Procurar la escalabilidad de los algoritmos propuestos en el *cluster* utilizado.



Columna de laboratorio.

Contribuciones al modelado y control de columnas de destilación

Natividad Duro Carralero. Autora
Fernando Morilla García. Director
 Departamento de Informática y Automática
 Fecha de lectura: 17 de enero de 2002

La destilación es el método de separación de sustancias químicas puras más antiguo e importante que se conoce. La época más activa de este área de investigación fue entorno a los años 70, no obstante, hoy en día es un área de investigación relevante, con una gran acogida tanto en el ámbito industrial como en el universitario.

El proceso de destilación es fundamental en la elaboración de numerosos productos industriales, tales como la obtención de bebidas alcohólicas o la elaboración de productos farmacéuticos. No obstante existen otras muchas industrias que utilizan el proceso, siendo sin duda la industria petroquímica el área industrial en la cual el proceso de destilación adquiere una mayor importancia.

Las columnas de destilación utilizadas para realizar el proceso constituyen un porcentaje significativo de la inversión que se realiza en plantas químicas y refinerías de todo el mundo. El coste de operación de las columnas de destilación es, a menudo, la parte más costosa de la mayoría de los procesos industriales en los que interviene. Por ello, el disponer de metodologías para modelar columnas de destilación y el desarrollar sistemas de control fiables es muy importante para un funcionamiento eficaz, seguro y óptimo de los sistemas de destilación industriales.

El objetivo principal de esta Tesis Doctoral ha sido obtener el modelo dinámico más o menos realista de una columna de destilación conti-

nua, binaria y de platos, que sea capaz de destilar cualquier tipo de mezcla.

Aparte de este objetivo principal, se han abordado los siguientes objetivos secundarios que se comentan a continuación:

- Conseguir que el modelo de la columna sea además muy modular, de forma que sea fácil modelar columnas con distinto número de platos y de distintas características.
- Facilitar una metodología de modelado de columnas de destilación, que permita modelar la columna ideal para la destilación de una mezcla dada en un punto de operación determinado.
- Modelar la columna de laboratorio (planta UOP3CC de Armfield).
- Probar distintas estrategias de control de inventario y calidad sobre algunas de las columnas modeladas.

La tesis se ha estructurado en seis capítulos, cuyo contenido se comenta a continuación:

- El primer capítulo comienza con una breve revisión histórica acerca del proceso de destilación, que pone de manifiesto la gran importancia del proceso desde sus orígenes hasta nuestros días, incluyendo una serie de referencias a distintos trabajos de interés. Continúa introduciendo las bases teóricas del proceso de destilación y del funcionamiento de las columnas de destilación, además de un breve repaso a distintas clasificaciones de las columnas continuas y de distintos tipos de platos, dado que la columna objetivo de modelar en este trabajo es una columna continua y de platos. Por último, se comentan las distintas estrategias de control que se pueden utilizar en una columna de destilación, dependiendo del tipo de variable que se desea controlar en cada caso. En este punto se introduce el control básico de columnas de destilación, que incluye tanto el control de inventario de la columna como el de composición, y se introduce también brevemente el control multivariable de las columnas de destilación.
- El segundo capítulo presenta el modelo de columna que se quiere conseguir y los pasos necesarios para conseguirlo. Se trata de una columna de destilación general, continua, binaria y de platos, capaz de destilar todo tipo de mezclas, ideales y no ideales. Para desarrollar el modelo se han considerado cuatro submodelos básicos que representan: un plato cualquiera de la columna, el plato de alimentación, el conjunto de cabeza y el conjunto de fondo. Por otro lado, como sobre el modelo de la columna se puede incorporar una estrategia de control de inventario descentralizado, además de los cuatro submodelos básicos se ha desarrollado un submodelo controlador. Todos los submodelos se han desarro-

llado en los entornos de Dymola y Simulink.

- El tercer capítulo describe un formulario de diseño y parametrización de columnas de destilación, capaz de generar la mejor columna de destilación para una mezcla dada y un punto de operación elegido. El formulario solicita al usuario una serie de datos que dependen de la mezcla y del punto de operación, y devuelve las especificaciones necesarias para generar e inicializar en estado estacionario la columna. El método de diseño utilizado es el de McCabe-Thiele y el modelo dinámico se genera en función de los submodelos presentados en el capítulo segundo. Por otro lado, como la columna lleva implementada una estrategia de control de inventario, se ha desarrollado un programa para facilitar la estimación de los modelos y se ha propuesto una herramienta de ajuste para los parámetros de control. El capítulo finaliza con una serie de ejemplos, cuyo objetivo es probar la eficiencia del modelo propuesto y del formulario desarrollado.
- El cuarto capítulo aborda una problemática distinta a la presentada en el tercero, en él se modela una columna concreta y se prueba en ella la destilación de distintas mezclas. La columna elegida (ver figura) es la columna de laboratorio de Arm-

field (planta UOP3CC). En su modelado participan los submodelos dinámicos propuestos en el capítulo segundo. No obstante, algunos de ellos presentan modificaciones importantes debido a las características específicas de la columna de laboratorio.

- El quinto capítulo muestra un ejemplo de control de calidad sobre una columna de destilación con control de inventario. Para ello se ha seleccionado una columna de 16 platos que destila una mezcla de agua y ácido acético. La columna se ha modelado siguiendo el mismo procedimiento que las descritas en el capítulo tercero. Incluye una estrategia de control de inventario descentralizada, haciendo uso de dos controladores PID. Sobre ella se prueba una estrategia de control centralizado, haciendo uso de dos controladores multivariables predictivos 2x2, cuyas características se comentan en el capítulo. Para cada uno de los controladores propuestos se muestra un ejemplo del comportamiento de la columna, debido a cambios provocados en las distintas variables de perturbación del proceso y en las consignas de la pureza de ambos productos.
- El sexto capítulo presenta un resumen de las aportaciones, conclusiones y líneas de trabajo futuras.

Desarrollo de patrones y realización de un sistema de referencia para la medida de la dispersión cromática en fibras monomodo

María Luisa Hernanz Sanjuán. Autora
Pedro Corredera Guillén. Director
Carmen Carreras Béjar. Tutora
 Departamento de Física de los Materiales
 Fecha de lectura: 7 de febrero de 2002

El auge de la Sociedad de la Información ha provocado un fuerte aumento en la capacidad de enviar

información y ha producido un rápido desarrollo de los sistemas de comunicaciones por fibra óptica.

Los científicos e investigadores han respondido a esta necesidad aportando un número increíble de soluciones. La atenuación de la fibra como límite inicial a la capacidad de transmitir información se ha eliminado con el desarrollo de los amplificadores ópticos de fibra dopada con erbio. Además del desarrollo de fibras de bajo dopaje en erbio y otros elementos, y el aprovechamiento de efectos no lineales como Raman y Brillouin, permiten pensar en utilizar las propias fibras ópticas como amplificador continuo a lo largo de la red instalada.

Unido al desarrollo de los amplificadores se han desarrollado sistemas de transmisión de solitones, sistemas de multiplexado de longitud de onda (WDM: Wavelength Division Multiplexing) y DWDM (Dense WDM)), que funcionando en las longitudes de onda próximas a la de dispersión nula permiten enviar gran número de comunicaciones usando la misma fibra y diferentes portadoras a varias longitudes de onda.

Al aumentar la potencia total transmitida en los sistemas de WDM se generan efectos no lineales, fundamentalmente mezcla de cuatro ondas (FWM), no deseables para la comunicación. Para su eliminación se están desarrollando fibras NZDF (Non Zero Dispersion Shifted Fibers) de perfiles de índice de refracción nuevos y que mantienen la dispersión cromática próxima a cero pero sin ser cero, para evitar mezcla de cuatro ondas, y el desarrollo de fibras de área efectiva grande.

Con estas perspectivas uno de los problemas fundamentales en las redes de comunicaciones actuales es el control de la dispersión cromática. El control de la dispersión cromática total en la transmisión es crítico para el diseño y construcción de sistemas de comunicaciones de alta velocidad, para lo que se requiere la medida precisa de la dispersión cromática.

En un sistema de transmisión por fibra óptica, en que los pulsos emitidos por los láseres no son totalmente monocromáticos, sino que presentan un ancho espectral $\Delta\omega$, la dispersión cromática se manifiesta en que cada

una de estas componentes espectrales viajan a distinta velocidad produciéndose un ensanchamiento del pulso, que matemáticamente depende de la segunda derivada de la constante de propagación con la longitud de onda. En el caso de fibras ópticas monomodo la dispersión cromática se puede obtener como suma de dos dispersiones, una que depende exclusivamente de la variación del índice de refracción con la frecuencia, que denominamos dispersión del material, y otra, la de dispersión en guía de onda, que depende de la geometría de la guía.

Las técnicas de medida de los parámetros dispersivos en las fibras ópticas monomodo se pueden agrupar como técnicas interferométricas, técnicas de retardo de impulsos y técnicas de desplazamiento de fase. En la memoria del trabajo se analizan las diferentes técnicas de medida de la dispersión cromática resaltando las ventajas e inconvenientes de cada una de ellas. Como resultado de este estudio se seleccionó la técnica de desplazamiento de fase ya que con ella se obtiene mayor resolución, es más estable y requiere un menor coste de medios.

El método de desplazamiento de fase consiste en modular sinusoidalmente en amplitud la portadora óptica a una frecuencia f_m y transmitirla por una fibra óptica de longitud L . La envolvente de la modulación se retarda un tiempo que sobre un periodo (L/f_m) corresponde a una diferencia de fase de 2π . Midiendo la diferencia de fase que introduce la fibra a diferentes

longitudes de onda se obtiene el retardo en función de la longitud de onda. Ajustando los valores experimentales a una función retardo y derivando esta función con respecto a la longitud de onda obtendremos el coeficiente de dispersión cromática (D_c), y los demás parámetros de dispersión: la longitud de onda de dispersión nula (λ_0) y la pendiente de la dispersión a dicha longitud de onda (S_0).

El sistema de medida desarrollado y que representamos en la figura 1, usa dos láseres sintonizables, uno permanece fijo a una longitud de onda, que usamos como referencia, y con el otro barremos las longitudes de onda de medida. Ambas señales se modulan con un modulador de intensidad tipo Mach-Zender, a frecuencias de modulación de 1GHz. Las dos señales moduladas, una vez han recorrido la fibra, son separadas por un multiplexor en longitud de onda y a través de un conmutador medimos la fase de cada una de las señales con un detector rápido de germanio y un analizador vectorial. El retardo entre las dos señales es el producido por la dispersión cromática y en el sistema diseñado es independiente de derivas electrónicas y térmicas. Una caja isoterma controla la temperatura durante el tiempo de medida eliminando los errores debidos a cambios por elongación de la fibra.

Con este sistema descrito es posible medir los parámetros de dispersión con la incertidumbre señalada en la Tabla I.

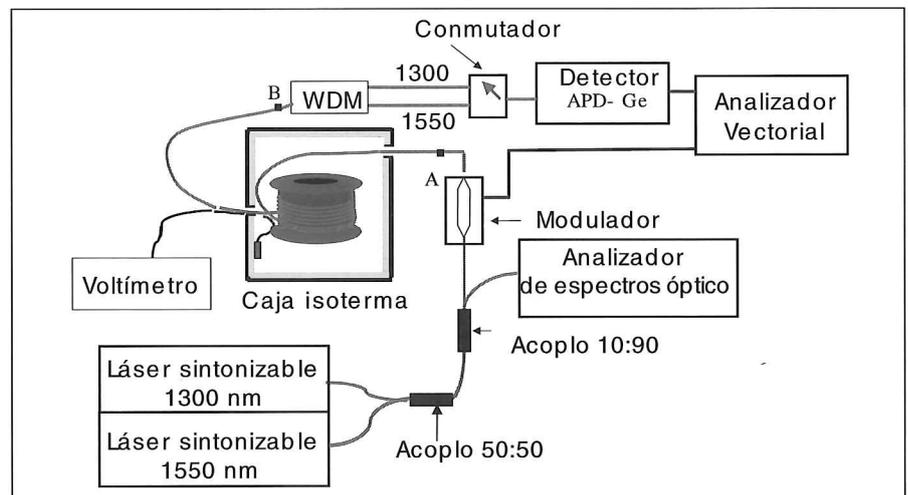


Figura 1. Esquema de medida de dispersión cromática con referencia simultánea.

Tabla I
Incertidumbres, en $k=2$, obtenidas en la medida de los parámetros de dispersión, con el sistema desarrollado

Parámetro	Incertidumbre ($k = 2$)
Retardo por unidad de tiempo (τ)	0.35 ps
Coefficiente de dispersión cromática (D_c)	0.05 ps/nm km
Longitud de onda de dispersión nula (λ_0)	0.05 nm
Pendiente de dispersión en λ_0 (S_0)	$2.87 \cdot 10^{-4}$ ps/nm ² km

Para identificar posibles errores sistemáticos hemos optado por verificar el sistema de referencia, empleando una técnica de medida que nos proporcione un valor directo (no derivado de otra medida) de alguno de los parámetros de dispersión, y que se base en un principio físico diferente al usado en el sistema de medida de referencia. Elegimos por medir la longitud de onda de dispersión nula a partir del estudio de la eficiencia de la generación de mezcla de cuatro ondas (Four Wave Mixing).

La mezcla de cuatro ondas es un efecto no lineal que aparece cuando hacemos incidir tres o más ondas de frecuencias f_i, f_j, f_k con potencia suficiente para generar una nueva de frecuencia F . Esta nueva onda se produce por interacción de la luz con el material que compone la fibra, y su generación será más eficiente cuando se dé la siguiente condición de adaptación en fase $\Delta\beta = \beta(f_i) + \beta(f_j) - \beta(f_k) - \beta(f_F) = 0$. El caso llamado "degenerado" en el que coinciden la onda i con la j , y que es el que ha centrado nuestra atención, la condición de adaptación de fase conduce directamente a la relación:

$$\Delta\beta = -\frac{\lambda^4 \pi}{3c^2} \frac{dD_c}{d\lambda} [2(f_s - f_0)(f_F - f_b)^2]$$

donde las señales incidentes las denominaremos de bombeo f_b y de sonda f_s . De esta expresión se obtiene que la longitud de onda de dispersión nula será la longitud de onda a la que se produce adaptación de fase, y por consiguiente mayor eficiencia de mezcla.

Para proceder a la medida de la longitud de onda de dispersión nula por mezcla de cuatro ondas se ha

desarrollado un sistema de medida que consta de dos láseres sintonizables, uno de bombeo y otro de sonda, que sintonizaremos en las proximidades de la longitud de onda de dispersión nula de la fibra. Para conseguir que ambas ondas interactúen con la misma polarización usamos dos controladores de polarización, que ajustamos hasta conseguir máxima potencia de onda de mezcla. Con un analizador de espectros óptico vamos registrando la potencia de la onda generada en función de la frecuencia de barrido del láser sonda.

La eficiencia de mezcla de cuatro ondas así obtenida para diferentes fibras muestra comportamientos distintos al comportamiento teórico esperado, lo que nos condujo a introducir un nuevo factor no tenido en cuenta en los análisis de mezcla

de cuatro ondas, relativo a la uniformidad de fibra. La introducción de la no uniformidad de longitud de onda de dispersión nula se realizó suponiendo continuidad de campo en la generación de mezcla de cuatro ondas para una hipotética fibra compuesta por tramos de fibras uniformes en atenuación, longitud de onda de dispersión nula y constante de propagación. Este estudio nos ha conducido al desarrollo de una expresión general que define la evolución de eficiencia de FWM a lo largo de una fibra no uniforme. Ajustando esta expresión para tramos de aproximadamente 500 m a las curvas experimentales obtenidas (figura 2) se han obtenido mapas de uniformidad de longitud de onda de dispersión nula de las fibras de laboratorio, determinando de forma concluyente las más uniformes, y por tanto las susceptibles de ser empleadas como patrones de dispersión cromática.

La comparación del valor medio de la longitud de onda de dispersión nula de los diferentes tramos obtenidos de los ajustes, con los obtenidos por el método de referencia (desplazamiento de fase) ha demostrado un total acuerdo de los métodos dentro de las incertidumbres. La medida de

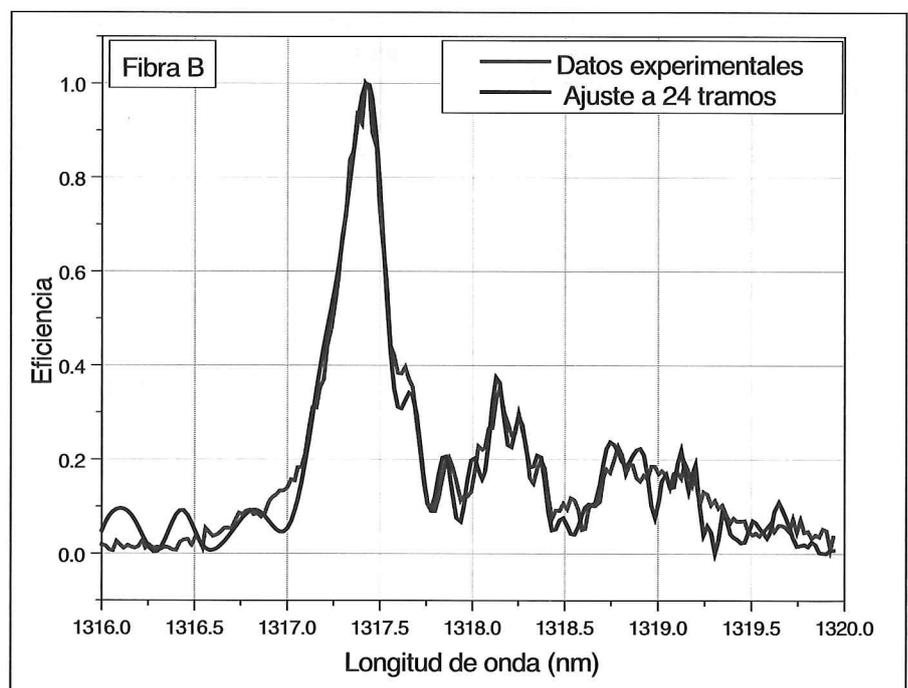


Figura 2. Eficiencia medida y ajustada de la onda FWM generada en una fibra.

la longitud de onda de dispersión nula por el método de FWM además de confirmarnos la validez del sistema de medida diseñado nos permite seleccionar fibras uniformes, susceptibles de ser calibradas para ser usadas como patrones por la industria, uno de los propósitos esenciales de los laboratorios de Metrología.

En definitiva, con la presente tesis doctoral el Departamento de Metro-

logía (y la comunidad científica española por extensión), dispone de un sistema de referencia de medida de los parámetros dispersivos de las fibras ópticas de telecomunicaciones, y la posibilidad de realizar patrones de dispersión cromática capaces de resolver los problemas metrológicos surgidos con los avances tecnológicos en nuevos sistemas de comunicaciones por fibra óptica.

Estudio de la dinámica en suspensiones magneto-reológicas sometidas a campos externos mediante el uso de técnicas ópticas. Procesos de agregación, formación de estructuras y su evolución espacio-temporal

Sonia Melle Hernández. Autora
Miguel Ángel Rubio Álvarez y Gerald G. Fuller. Directores
Departamento de Física Fundamental
Fecha de lectura: 4 de marzo de 2002

En la década de los 50 se descubrieron unos nuevos materiales a los que se les denominó "materiales inteligentes". Estos materiales sufren una transformación cuando se aplica sobre ellos un campo externo pasando de un estado en el que pueden fluir libremente, como si de un líquido se tratase, a un estado en el que la resistencia al flujo es muy alta. Esta transformación puede ser muy rápida, es reversible y está controlada por el campo aplicado. Los fluidos magneto-reológicos, suspensiones de partículas magnetizables dispersas en un fluido no magnético, son un tipo de materiales inteligentes que sufren cambios en su estructura y propiedades mecánicas (reológicas) y ópticas cuando sobre ellos se aplica un campo magnético. En ausencia de campo se comportan como fluidos newtonianos pero cuando se aplica un campo magnético, las partículas que forman la suspensión se agregan formando cadenas alineadas en la dirección del campo. Estas cadenas restringen el movimiento del fluido provocando un aumento drástico de su viscosidad. El interés aplicado de estos fluidos se basa

principalmente en el hecho de que las propiedades mecánicas de estas suspensiones pueden ser controladas por medio de señales eléctricas, lo que hace que sean especialmente útiles en dispositivos de control de vibraciones, como amortiguadores, embragues y frenos magnéticos.

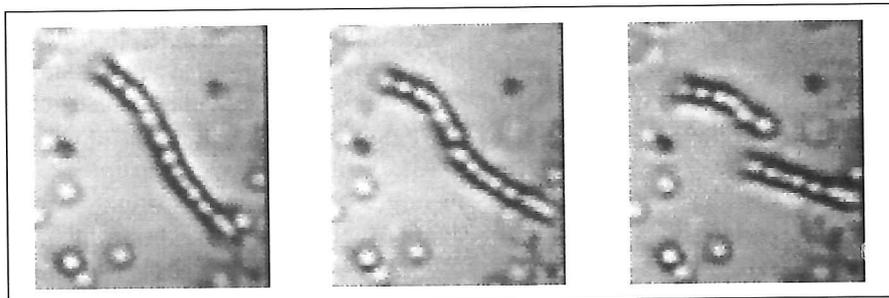
El cambio microestructural que sufren las suspensiones magneto-reológicas en presencia de un campo externo induce una anisotropía óptica en el medio. De ahí que la utilización de técnicas ópticas basadas en la utilización de luz polarizada, como son la polarimetría y el scattering, sea de gran utilidad para estudiar la formación de las estructuras inducidas y su

evolución dinámica en presencia de campos externos. Por otro lado, desde un punto de vista fundamental, este tipo de suspensiones constituye un sistema modelo para el estudio de los procesos de agregación en suspensiones dipolares en las que la interacción entre partículas puede ser controlada externamente variando la amplitud del campo aplicado.

El principal objetivo de esta Tesis ha sido estudiar experimentalmente los procesos de agregación de las partículas que forman las suspensiones magneto-reológicas así como la dinámica de las estructuras que se inducen cuando sobre ellas actúan campos magnéticos externos en dos configuraciones espacio-temporales distintas (campos unidireccionales pulsados y campos rotantes).

Bajo campos unidireccionales pulsados las imágenes de videomicroscopía muestran que la longitud de las cadenas inducidas aumenta con la amplitud del campo aplicado y con el tiempo. En este contexto, se ha estudiado en detalle, utilizando la técnica de dicroísmo, el tipo de agregación que tiene lugar en el régimen de agregación difusivo a tiempos largos. Así, se obtienen dos regímenes distintos caracterizados por diferentes exponentes dinámicos. Nuestros resultados experimentales han sido interpretados en términos de un modelo de agregación con correcciones de interacción hidrodinámica.

Bajo campos magnéticos rotantes los patrones de scattering de luz muestran la formación de cadenas que rotan con el campo. Se ha estudiado en detalle la evolución temporal de dichas estructuras, sobre las que actúa un par de giro al que se



Imágenes secuenciadas de la ruptura de una cadena rotante causada por la fricción viscosa (diámetro aproximado de las partículas 1 μm).

opone la fricción viscosa. Esta competición limita el tamaño máximo admisible de cadena. Las cadenas estables siguen la rotación del campo con una cierta deformación y desfase. Mediante experimentos de dicroísmo se ha realizado un análisis de los distintos regímenes dinámicos que aparecen en el sistema en función de los parámetros relevantes (viscosidad, magnetización, fracción de volumen y temperatura). La téc-

nica de videomicroscopía nos ha permitido también visualizar directamente los procesos de agregación y fragmentación, y estudiar el tamaño, la forma y la orientación de las estructuras inducidas en campos rotantes.

En resumen, esta Tesis constituye un gran avance en el estudio de la microestructura de las suspensiones magneto-reológicas sometidas a campos externos.

pesar de todo, estos sistemas tienen grandes aplicaciones como composites con propiedades electroópticas. En el caso de los medios liotrópicos; éste es un problema abierto y de gran actividad científica en la actualidad por las siguientes razones; desde el punto de vista fundamental, es interesante por su analogía con los medios biológicos, ya que las células contienen gran cantidad de macromoléculas altamente específicas; además muchas reacciones que en ellas se producen ocurren en las membranas celulares, que son sistemas organizados³; desde el punto de vista aplicado, es muy atractiva la posibilidad de controlar la estructura de los polímeros en el orden de los nanómetros ya que, por ejemplo, esto permitiría obtener redes de polímero bicontinuas con un diámetro de poro formalmente monodisperso, que podrían ser utilizables, por ejemplo, como moldes para la fabricación de materiales cerámicos porosos.

El dioctil sulfosuccinato sódico (AOT) contiene una parte hidrófila, el grupo sulfosuccinato, y otra hidrófoba, compuesta por una doble cadena hidrocarbonada por lo que en presencia de agua da una estructura laminar en un intervalo grande de concentraciones. En ellas las moléculas de AOT forman bicapas planas donde su parte polar está en contacto con el agua. Estas bicapas se disponen paralelamente separadas entre sí por capas de agua. El AOT es un surfactante muy utilizado, tanto para aplicaciones industriales como para investigación, si bien gran parte de ellas se centran en el estudio de las emulsiones y microemulsiones.

La poli(N,N-dimetilacrilamida) es un polímero no iónico donde el nitrógeno de la amida está unido a dos metilos y por su solubilidad en agua se emplea en aplicaciones como la liberación controlada de fármacos o la fabricación de lentes de contacto.

En este trabajo se determina la influencia mutua entre la poli(N,N-dimetilacrilamida) y la mesofase

Sección de Químicas

Poliacrilamidas en mesofases laminares

Isabel Esteban Pacios. Autora
Carmen Sánchez Renamayor. Directora
Arturo Horta Zubiaga. Codirector

Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas
Fecha de lectura: 1 de marzo de 2002

Los cristales líquidos (CL) son mesofases de la materia, es decir fases intermedias entre un líquido y un sólido. Se trata por tanto de líquidos con cierto orden posicional u orientacional de largo alcance en al menos una dirección espacial. Existen dos grandes familias dentro de los cristales líquidos¹:

- 1) Los cristales líquidos termotrópicos son aquellos en los que las mesofases se generan por efecto de la temperatura y se emplean en la actualidad para desarrollar múltiples aplicaciones como: pantallas de monitores, paneles informativos, termómetros, etc.
- 2) Los cristales líquidos liotrópicos están formados por mezclas de al menos dos sustancias (un mesógeno y un disolvente) y el mesomorfismo se produce por variación de la composición de la mezcla. Estos tipos de CL son muy importantes, pues procesos tan variados como: la detergencia, la recuperación de restos de petróleo o el fun-

cionamiento de la membrana celular, se basan en esta propiedad.

Las reacciones de polimerización producen en general sistemas desordenados a nivel supramolecular, aunque se han sintetizado polímeros que tienen propiedades de cristales líquidos (liotrópicos o termotrópicos) y que, por tanto, forman mesofases. En el caso de los polímeros liotrópicos, esta propiedad permite procesarlos de forma tal que se obtienen materiales con un elevado módulo de tensión (pensemos por ejemplo en las fibras de kevlar que se emplean para la fabricación de chalecos antibalas²). Desde hace algunos años ha surgido un reto aún mayor, ¿sería posible confinar "polímeros comunes" que no sean cristales líquidos en el seno de una estructura ordenada, formada por un medio CL termotrópico o liotrópico? Se han hecho muchos intentos por disolver polímeros comunes en mesofases termotrópicas, pero generalmente es difícil ya que, salvo raras excepciones, se suele producir una separación de fases. A

laminar formada por el AOT, en agua. Hemos empleado tres vías para introducir el polímero en el medio: la mezcla, la síntesis *in situ*, y la síntesis *in situ* del polímero entrecruzado. El sistema mezclado es el de referencia, ya que permite variar de forma sencilla la composición, y aunque este sistema no ha sido previamente estudiado, sí podemos encontrar en la literatura científica trabajos para otras mezclas.

Entre las novedades que aporta esta tesis podemos destacar que:

- Existen muy pocos trabajos en los que se hayan sintetizado polímeros sin entrecruzar en mesofases laminares.
- Hasta donde sabemos, en ningún caso se ha realizado la síntesis partiendo de un sistema bifásico (sin orden de largo alcance + laminar).
- No existe ningún sistema estudiado desde los tres puntos vista: mezcla, síntesis *in situ* y síntesis *in situ* en presencia de un entrecruzante.
- Generalmente estos estudios se centran en la caracterización del tipo de estructuras, pero no se analiza la composición de las fases, ni se caracteriza el polímero obtenido.

De acuerdo con el objetivo propuesto, a lo largo de este trabajo exploramos dos aspectos: (i) el estudio de las fases del sistema formado y (ii) la caracterización de los polímeros obtenidos. Hemos analizado la organización del sistema ternario, tanto en las mezclas como en los sistemas polimerizados. Con el fin de conocer los cambios estructurales que pueden encontrarse en el medio, así como en el polímero cuando se sintetiza en un entorno que inicialmente contiene estructuras organizadas, y hemos contrastado este comportamiento en el caso de polimerizaciones con y sin entrecruzante.

La adición del polímero en el medio laminar formado por AOT y agua produce una separación de

fases a escala microscópica ya que la alta viscosidad que presentan las muestras impide su separación macroscópica. En estas mezclas la poli(N,N-dimetilacrilamida) se encuentra en una fase, el AOT en otra y el agua está repartida entre ambas⁴. En la fase con AOT, éste se encuentra organizado en una mesofase laminar en la que las capas de agua presentan un espesor menor del que le correspondería respecto al contenido acuoso global de las mezclas, y depende de las cantidades relativas de AOT y de polímero. Se ha demostrado que el reparto de agua entre ambas fases está determinado por el equilibrio entre la repulsión electrostática de las bicapas y la presión osmótica del polímero⁵.

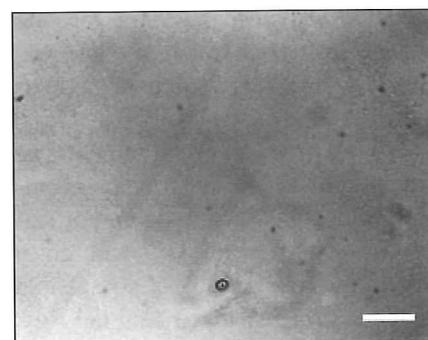
En el caso de la síntesis en mezclas con y sin entrecruzante el sistema final presenta, al menos, tres zonas macroscópicas bien diferenciadas. Entre ellas, las más importantes, por su volumen, estabilidad y alto contenido en AOT y polímero son la más densa y su vecina. Su aparición está determinada por los cambios en el diagrama de fases durante la reacción y la viscosidad de las muestras. Estas zonas están compuestas, a su vez, por dos microfases en las que el reparto de sus componentes (AOT, polímero y agua) es similar al de las mezclas. El polímero lineal obtenido en las muestras es igual al sintetizado en agua sin AOT, mientras que los hidrogeles encontrados en las zonas presentan claras diferencias tanto en su morfología como en el grado de hinchamiento siendo también diferente con el hidrogel sintetizado en agua (ver figura adjunta).

REFERENCIAS

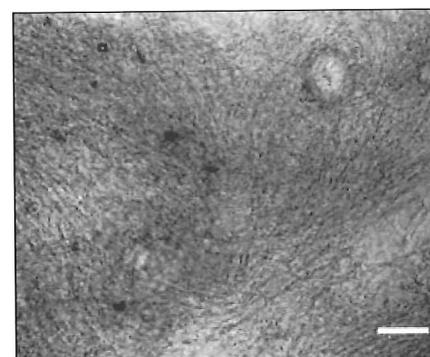
- [1] B. Bahadur, "Liquid crystals: applications and uses", vol. 1, 2 y 3, World Scientific, Singapur (1992).
- [2] A. Horta, C. S. Renamayor, A.P. Dorado, I.F. Piérola, "Los plás-

ticos más usados", UNED, Madrid (2000).

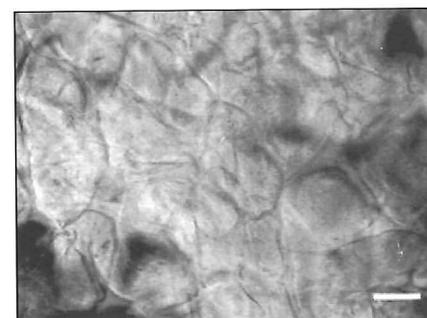
- [3] A.G. Petrov, "The Lyotropic State of Matter", Gordon and Breach Science Publishers, Singapur (1999).
- [4] I.E. Pacios, B. Lindman, A. Horta, K. Thuresson, C.S. Renamayor. Colloid Polym. Sci. (2002, en prensa).
- [5] I.E. Pacios, C.S. Renamayor, A. Horta, B. Lindman, K. Thuresson. J. Phys. Chem. B. (2002, en prensa).



a)



b)



c)

Morfología de los hidrogeles sintetizados en a) agua, b) la zona inferior c) la zona vecina a la inferior de las muestras con AOT.